

高度好熱菌 *Thermus thermophilus* HB8 由来 YdjC family protein TTHB029 の 結晶構造解析

Takahito Imagawa^{1,2}, Hitoshi Iino², Mayumi Kanagawa², Akio Ebihara², Seiki
Kuramitsu² and Hideaki Tsuge^{1,2}

今川貴仁^{1,2}、飯野均²、金川真由美²、海老原章郎²、倉光成紀²、津下英
明^{1,2}

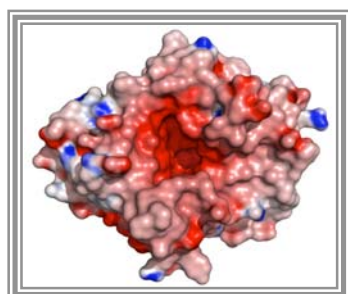
(¹Tokushima Bunri University, ²RIKEN Harima Institute at Spring-8)

(¹徳島文理大学, ²播磨理研)

E-mail T.I.: gin1976jp@yahoo.co.jp

セルビオース利用のために働く大腸菌の *cel* オペロンは *celABCDFG* の 6 つの遺伝子群からなり、*celABC* はホスホエノールピルビン酸:糖 ホスホトランスフェラーゼシステム (PTS)での糖の取り込みに関わっている enzyme IIB、enzyme IIC、及び enzyme IIA とホモログである。*celD* はリプレッサーの役割をしていると考えられており、*celF* はホスホベータグルコシダーゼをコードしている。*celG* の機能は不明であり、別名 hypothetical protein YdjC と呼ばれている。YdjC family はバクテリアからヒトまで広く分布しているが、その機能及び立体構造は報告されていない。YdjC family の構造と機能を明らかにするため、我々は *Thermus thermophilus* HB8 由来の YdjC ホモログ TTHB029 の立体構造を 2.9 Å 分解能で明らかにした。TTHB029 の全体構造は、(β/α) barrel ホールドを有するホモダイマー構造を形成しており、活性部位と考えられるサイトには Asp-21、His-60、His-127 に Mg²⁺ が配位した形で存在した。

Dali サーチより TTHB029 と構造類似性の高い酵素を検索した結果、*Streptococcus pneumoniae* 由来の peptidoglycan GlcNAc deacetylase (*SpPgdA*) (PDB ID 2C1I, RMSD of 2.9 Å for 166 Cα pairs; 15 % sequence identity)と構造類似性が高いことが分かった。*SpPgdA* の全体構造は 3 つのドメインからなり、活性部位を含む C 末ドメインは TTHB029 同様、Asp-276、His-326 及び His-330 からなる金属結合部位を有しており、基質である GlcNAc を 2 価金属イオン依存的に脱アセチル化する。*SpPgdA* と TTHB029 とのシーケンス類似性は低いにも関わらず、トポロジー及び活性部位周辺の残基は類似点が多い。しかし、大きな違いは 2 つの酵素間で金属結合に関わるヒスチジンはそれぞれ異なるループが使用されている点である。更に、TTHB029 と他の YdjC family とのシーケンスを比較した結果、金属結合に重要であると考えられる残基(Asp-21、His-60、His-127)は全ての酵素で保存されていた。これらの結果から、YdjC family と *SpPgdA* の特徴をまとめ比較する。



TTHB029 の分子表面静電ポテンシャル図