

Sphingobium sp. MI1205 由来 ハロアルカンデハロゲナーゼ LinB の結晶構造解析

○岡井公彦¹ 大塚淳¹ 山村昭裕¹ 今井ファビアナリカ¹ 永田裕二²
永田宏次¹ 田之倉優¹(¹東大院・農生科 ²東北大院・生命科)

我が国では HCH(hexachlorocyclohexane)や DDT などの有機塩素化合物を農薬として使用していたが、これらは毒性が強く、難分解性、生物蓄積性を有する化合物であったため、1970 年代初頭に製造や使用が禁止された。これらの化合物は使用が禁止された後、地中への埋設処理が実施されたため、現在も尚、汚染を引き起こす可能性が危惧されている。

HCH は有機塩素系殺虫剤の一種であり、塩素の位置により異性体が存在する。殺虫剤としての機能は γ -HCH のみ保持しているが、製造過程で β -HCH も作られる。 β -HCH は6つの塩素がエクアトリアル位置にあるため異性体の中で最も安定に存在している化合物である。近年、 β -HCH を TCCL(2,3,5,6-tetrachlorocyclohexane-1,4-diol)まで分解するデハロゲナーゼ LinB_{MI} が見つかった。本研究では反応メカニズムを明らかにするために LinB_{MI} の構造解析を行った。

LinB_{MI} の構造は分子置換法により、1.6 Å の分解能で決定した。LinB_{MI} は単量体として存在しており、 α/β -hydrolase fold を持つコアドメインと基質特異性に関わるヘリックスから成るキャップドメインより構成されていた。LinB_{MI} の全体構造は β -HCH を PCHL(2,3,4,5,6-pentachlorocyclohexanol)まで分解するデハロゲナーゼ LinB_{UT} と非常に類似していた。両者は7アミノ酸の違いしか持たないにも関わらず、反応メカニズムが異なっている。構造の重ね合わせの結果より、活性部位近傍に位置している V134、活性ポケットの入り口に位置している H247、T135-I253-L138 間の相互作用が反応メカニズムの違いに影響を与えていると考えられた。