

甘蓝型油菜烯酰基还原酶机理分析

Mechanism analysis of enyl reductase in *Brassica napus* L

汇报人：范一铭

日期：2021.5.10

小组成员

编号	姓名	研究所	分工
3G02A	穆雨	油料所	烯酰基还原酶基本信息
3G02B	罗自舒	油料所	烯酰基还原酶作用机制
3G02C	范一铭	油料所	烯酰基还原酶作用机制

目录

CONTENTS

01

背景介绍

02

基本简介

03

结构及机理分析

04

参考文献

- 2.在油菜成熟种子（甘蓝型油菜）的脂质沉积过程中，烯酰基载体蛋白还原酶水平升高。
- 3.深入了解在脂肪酸从头合成中，烯酰基载体蛋白还原酶与底物结合的催化机制。

植物界、被子植物门、木兰纲、白花菜目、十字花科、芸薹属

物种：甘蓝型油菜

英文名：Brassica napus(Rape)

拉丁名：Brassica napus L

植物中主要存在场所：叶绿体

蛋白质登录号：P80030

序列条目：FABI_BRANA

蛋白名：Enoyl-[acyl-carrier-protein] reductase [NADH]

基因名：N/A

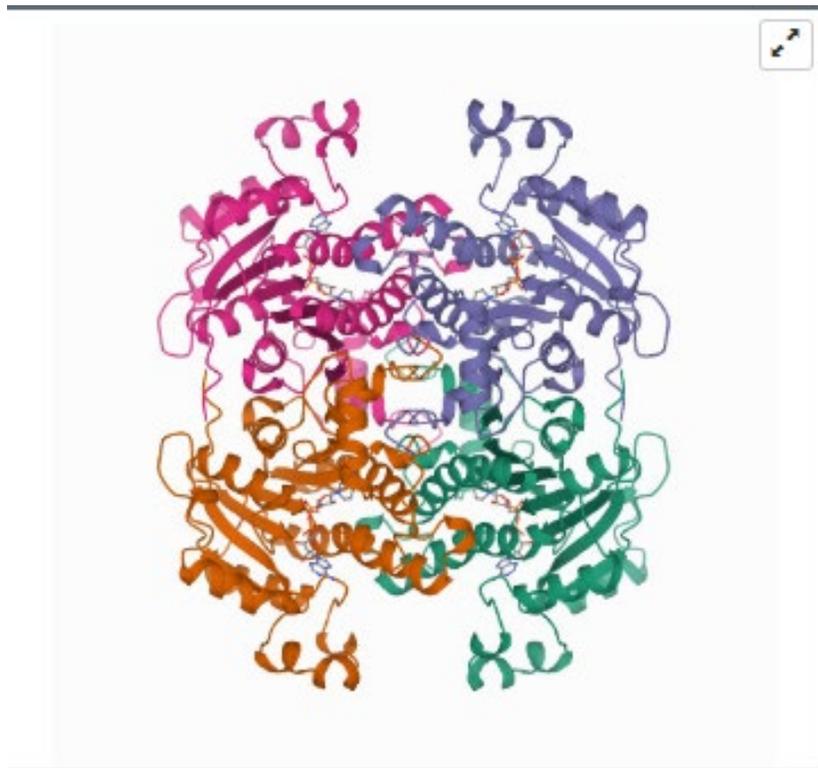
家族名称：短链脱氢酶/还原酶家族

03

结构及机理分析

1. 蛋白质结构

烯酰基还原酶由同源四聚体组成



长度	肽链	小分子配物	作用
312个氨基酸	A链	NAD	催化NAD (P) H依赖性的反式2-烯酰基酰基载体蛋白的还原，这是从头进行脂肪酸生物合成的重要步骤

1ENO(1.90Å)



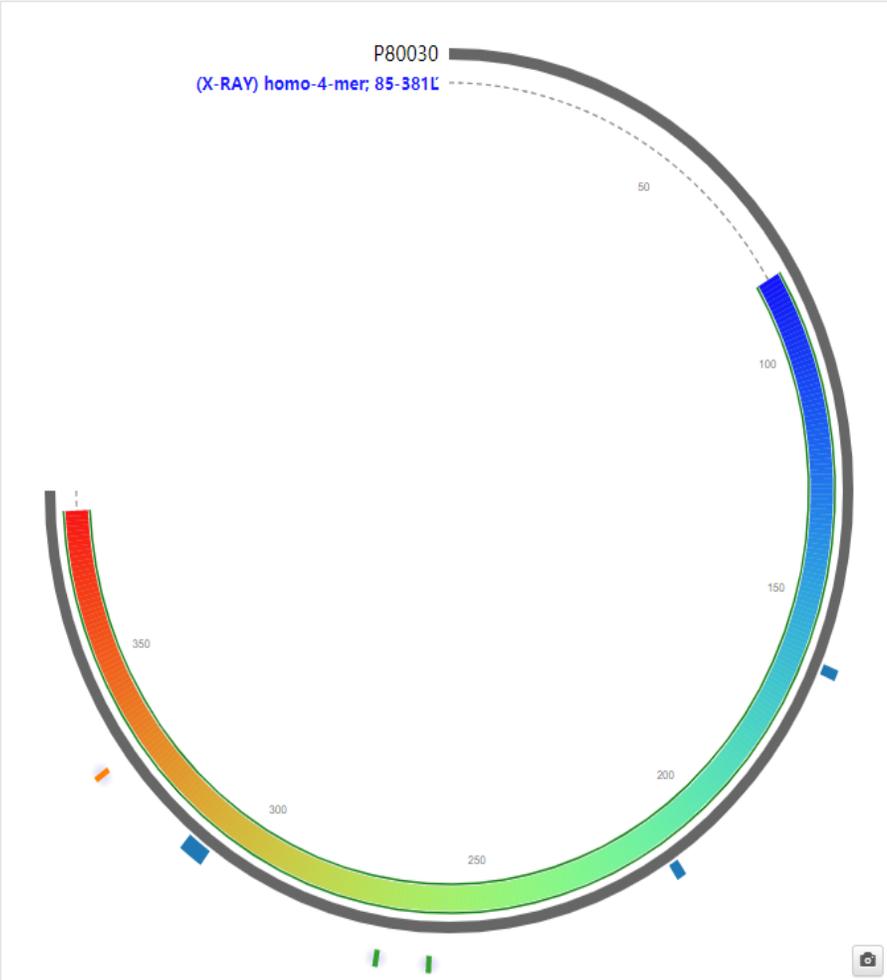
03

结构及机理分析

P80030 (FABI_BRANA) *Brassica napus (Rape)*

Enoyl-[acyl-carrier-protein] reductase [NADH], chloroplastic [★ UniProtKB](#) [InterPro](#) [Interactive Modelling](#)

385 aa; Sequence (Fasta)



X-ray Diffraction, 1.90Å

1ENO "BRASSICA NAPUS ENOYL ACP REDUCTASE/NAD BINARY COMPLEX AT PH 8.0 AND ROOM TEMPERATURE"

Released: 1996-10-14

Coordinates: [↓](#)

4 x NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE [🗄](#)

[RCSB](#) [PDB](#) [PDB-KB](#) [PDBj](#) [PDBsum](#)

Sequence Features [^](#)

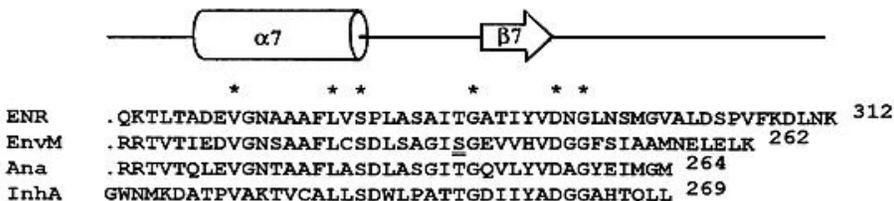
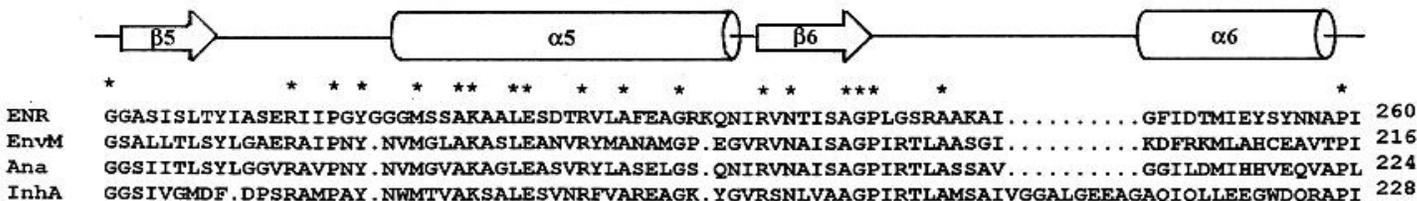
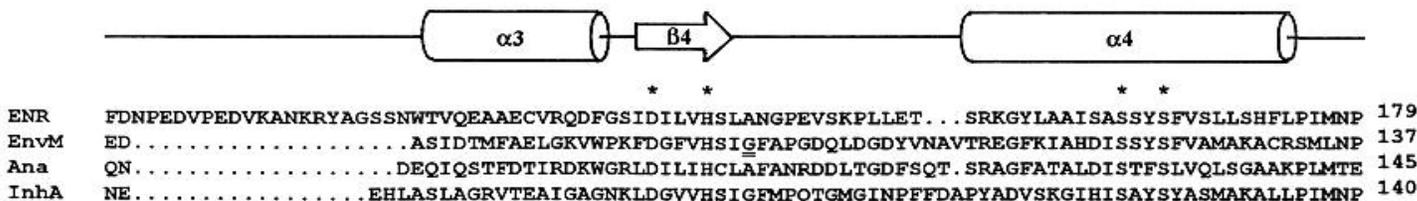
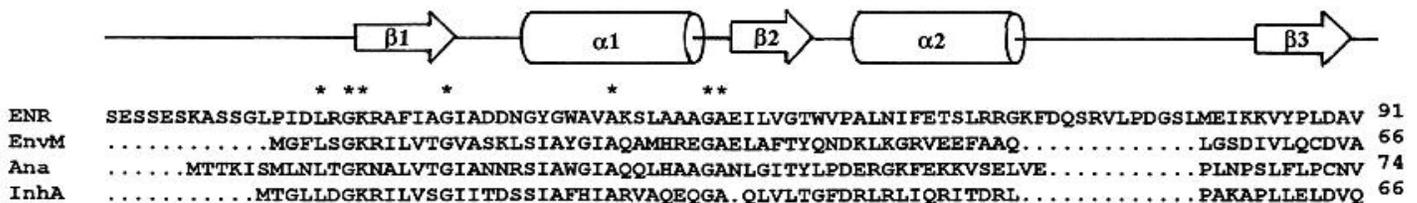
Active Site Natural variant Nucleotide binding

[+ Add](#)

	261	Proton acceptor
	271	Proton acceptor
	333	I -> V
	162-163	NAD
	209-210	NAD
	309-313	NAD

结构及机理分析

2、机理分析——关键活性位点

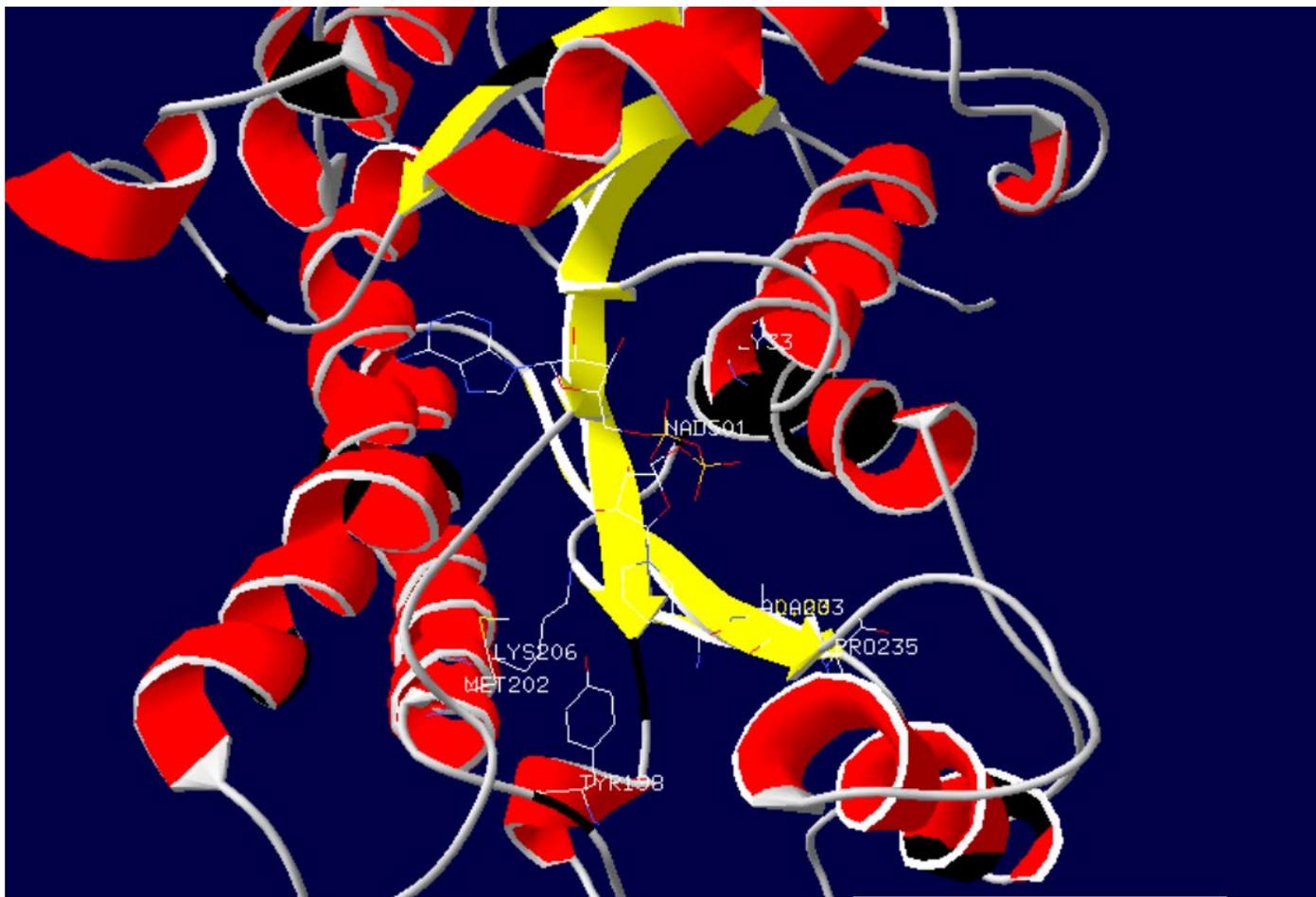


不同物种：
 此图为甘蓝型油菜 (ENR)，大肠杆菌 (EnvM)，鱼腥藻 (Anabenasp) 和结核分枝杆菌 (InhA) 的烯醇酰还原酶多序列比对结果。存在36个完全保守的残基。

(Rafferty JB, 1995)

03

结构及机理分析



当这些完全保守的残基被绘制到甘蓝型油菜酶的三维结构上时, Tyr198、Met202、Lys206、Ala233、Gly33和Pro235紧挨着NADH的烟酰胺环。NADH烟酰胺环附近的这些疏水残基拟形成底物结合位点, 对于底物识别或酶的化学性质是至关重要的。

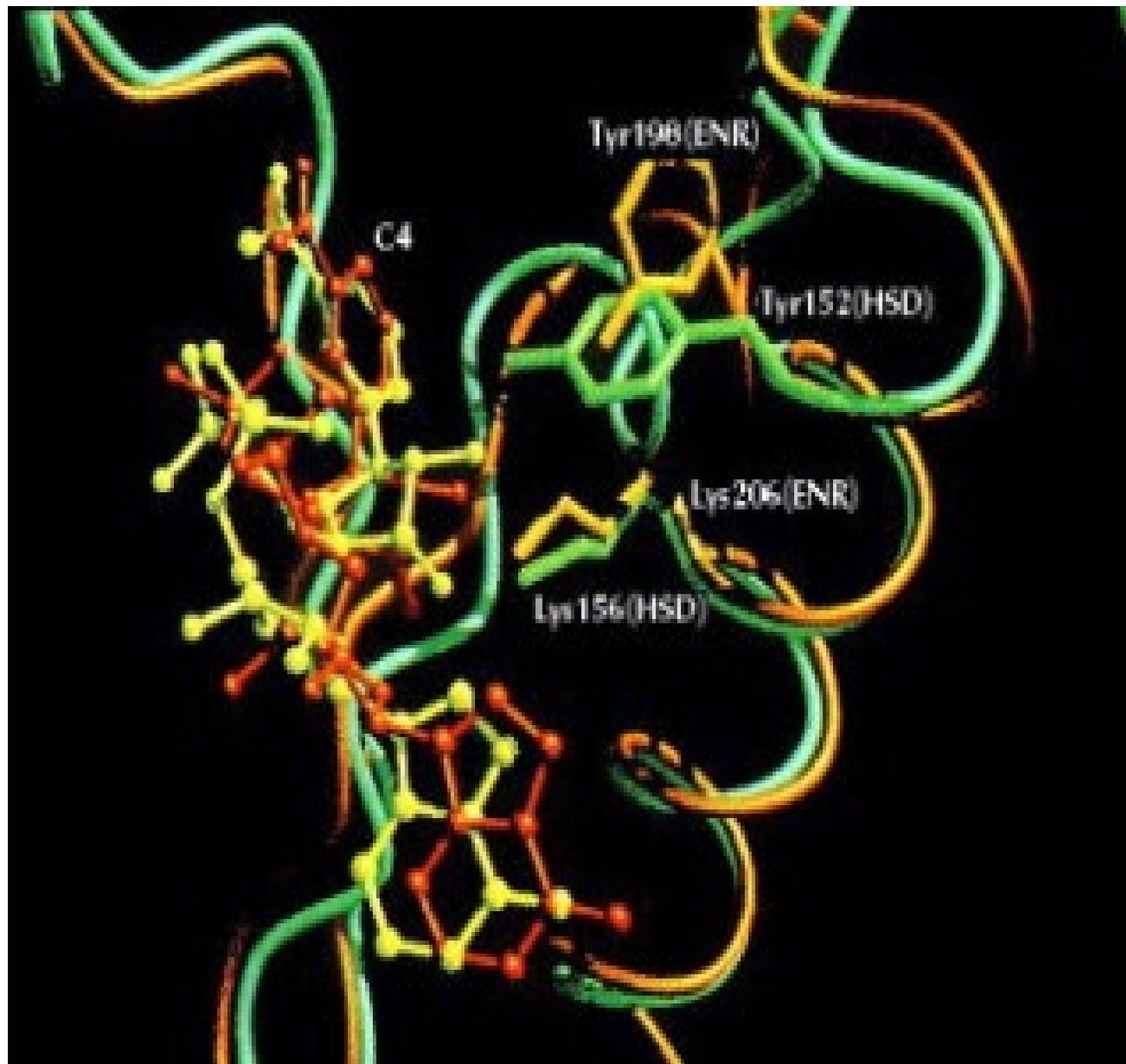
03

结构及机理分析

2、机理分析——关键活性位点

短链脱氢酶家族

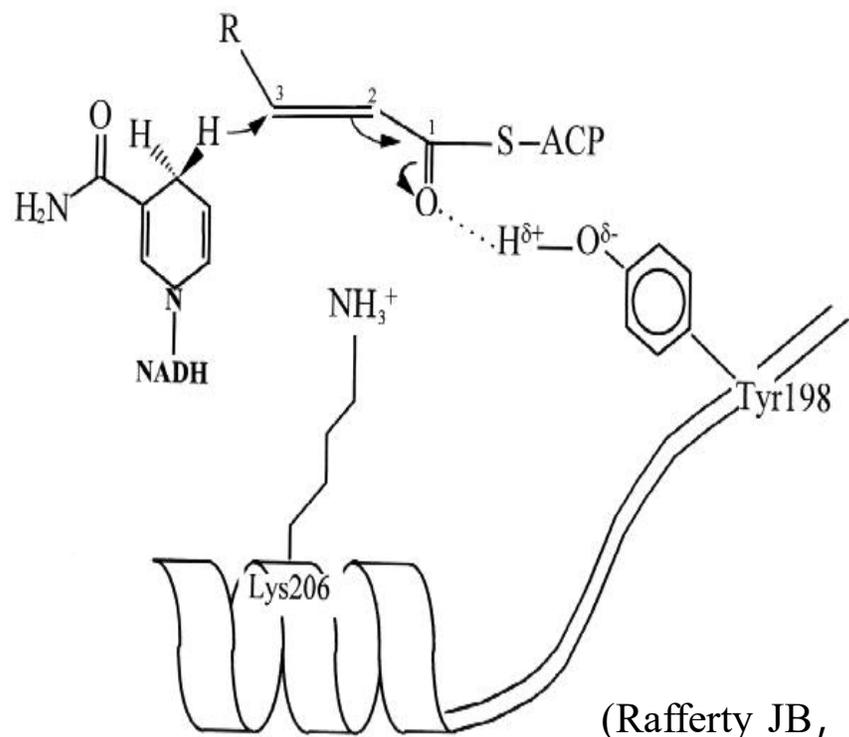
通过叠加链霉菌羟基类固醇脱氢酶 (HSD) 和ENR的结构, 可以看出HSD中的Lys156残基在结构上等同于ENR中的Lys206。HSD中Tyr152与ENR中Tyr198具有近似的等价性。



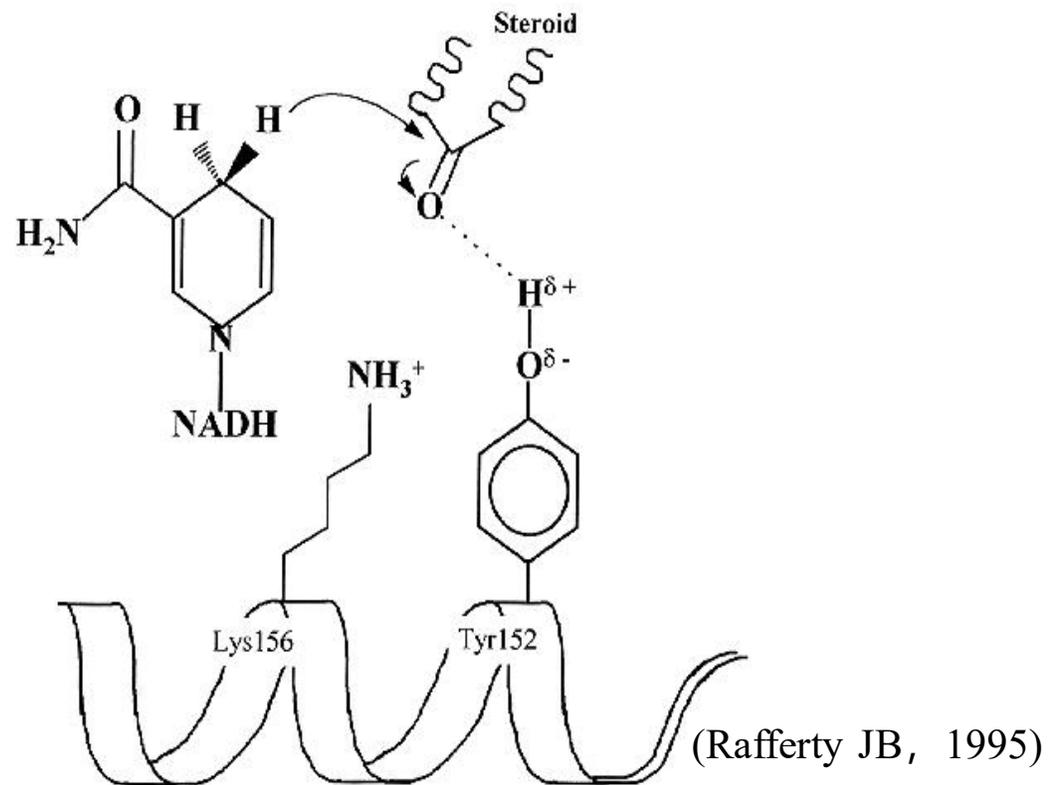
(Rafferty JB, 1995)

2、机理分析——关键活性位点

a



b



ENR和HSD还原底物的催化机理： (a) 通过ENR还原烯丙基底物中的双键。 (b) 通过HSD还原类固醇底物中的酮基。

03

结构及机理分析

2、机理分析——关键活性位点

结合NADH的位置，加上涉及来自其他来源的烯酰基还原酶的多
个序列比较，使我们能够得出：ENR中的Tyr198和Lys206是两个关键
活性位点残基。

综上，反映了烯酰基载体蛋白还原酶与底物结合的催化机理。

参考文献

【1】 Rafferty JB, Simon JW, Baldock C, Artymiuk PJ, Baker PJ, Stuitje AR, Slabas AR, Rice DW. Common themes in redox chemistry emerge from the X-ray structure of oilseed rape (*Brassica napus*) enoyl acyl carrier protein reductase. *Structure*. 1995 Sep 15;3(9):927-38. doi: 10.1016/S0969-2126(01)00227-1. PMID: 8535786.

【2】 Slabas AR, Cottingham I, Austin A, Fawcett T, Sidebottom CM. Amino acid sequence analysis of rape seed (*Brassica napus*) NADH-enoyl ACP reductase. *Plant Mol Biol*. 1991 Oct;17(4):911-4. doi: 10.1007/BF00037071. PMID: 1912504.

【3】 Roujeinikova A, Sedelnikova S, de Boer GJ, Stuitje AR, Slabas AR, Rafferty JB, Rice DW. Inhibitor binding studies on enoyl reductase reveal conformational changes related to substrate recognition. *J Biol Chem*. 1999 Oct 22;274(43):30811-7. doi: 10.1074/jbc.274.43.30811. PMID: 10521472. 1912503.

非常感谢您的观看

汇报人：范一铭
组 员：穆雨
罗自舒

日期：2021.5.10