产甲烷菌中甲酰甲烷呋喃脱氢酶的序列和结构分析

Sequence and Structure Analysis of Methylfuran Dehydrogenase in Methanogenic Bacteria

2G06组：邢宏阳、刘鑫、王庆涛、邹淑琦

汇报人：邹淑琦

2022-05-14

目录

CONTENTS

研究背景

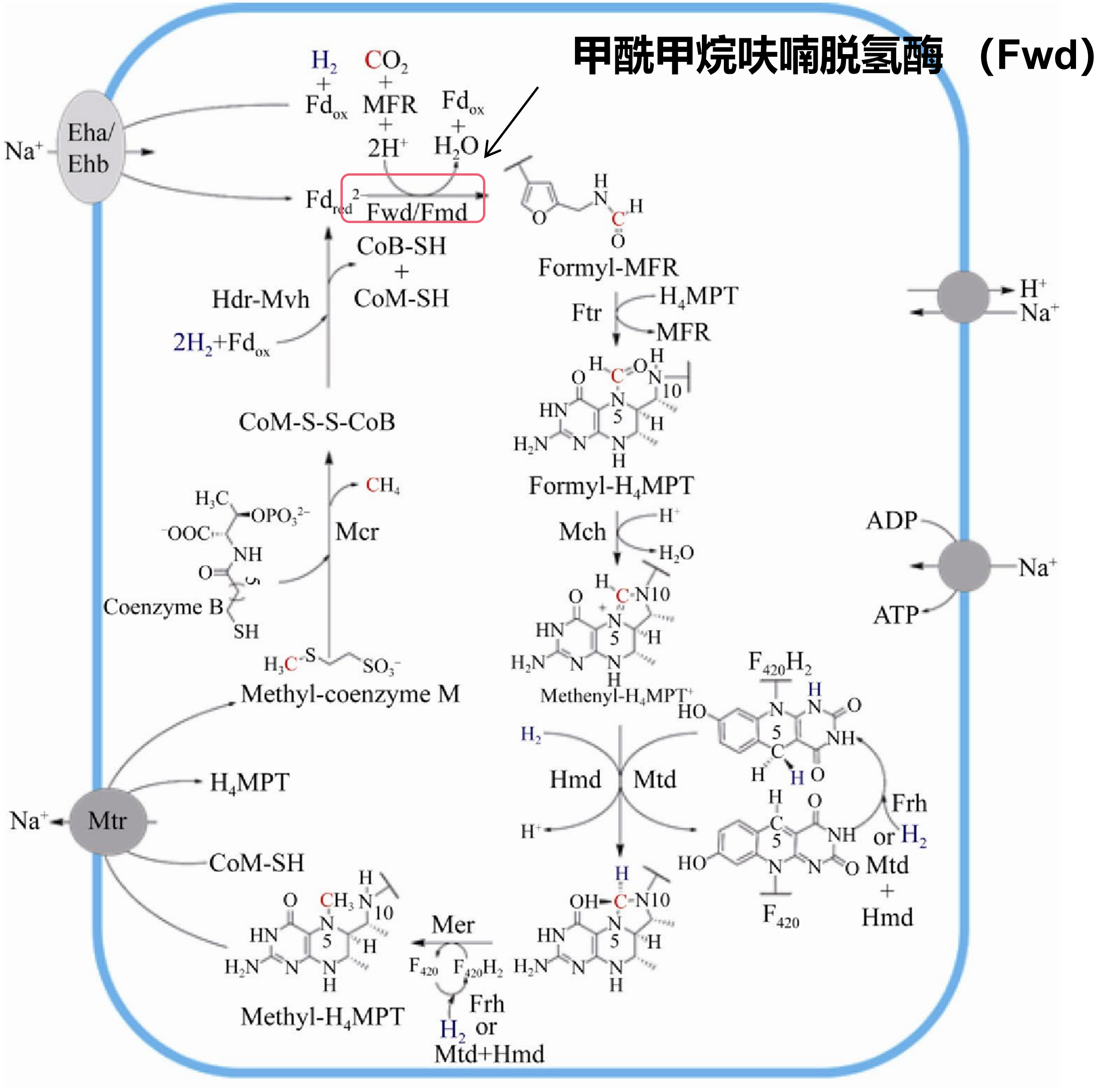
氢营养型产甲烷古菌获取能量的唯一方式——**产甲烷代谢**

$$CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O \quad \triangle H_{298K} = -252.9\ \text{kJ/mol}$$

需能极低

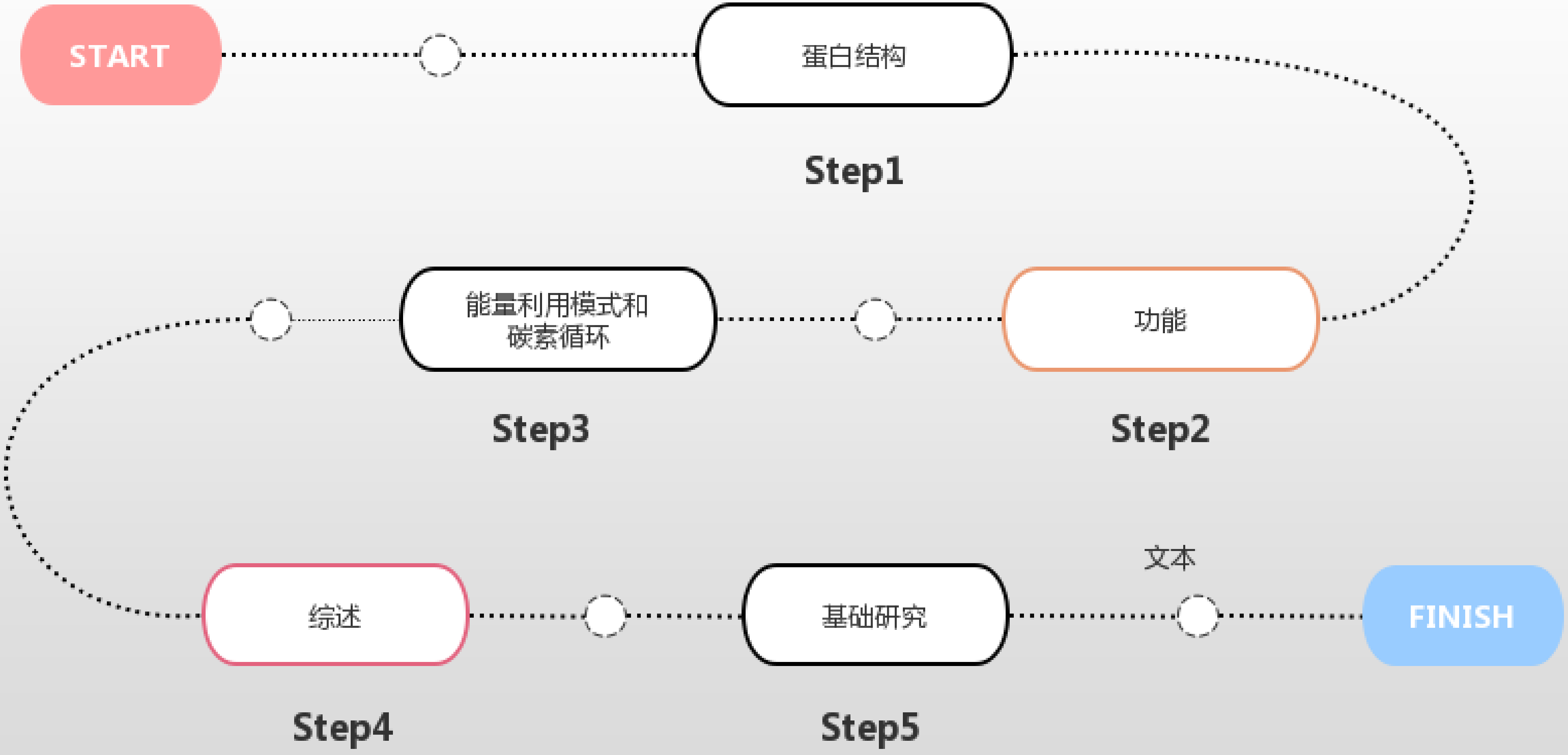
高效利用

➢ 研究背景



甲酰甲烷呋喃脱氢酶 （Fwd）

研究背景


START

蛋白结构

Step1

功能

Step2

能量利用模式和碳素循环

Step3

综述

Step4

基础研究

Step5

文本

FINISH

➢ 课题相关信息

- 课题相关物种信息：

  中文名：沃尔夫甲烷热杆菌

  拉丁名：Methanothermobacter wolfeii

  (Methanobacterium wolfei)

- 蛋白相关注释：

  蛋白名：formylmethanofuran dehydrogenase

  蛋白基因名：*fwdA*、*B*、*C*、*D*、*F*、*G*

  蛋白登录号：O74030、 O74032、 O74031 、

  O74029 、O74028 、Q1MVD4

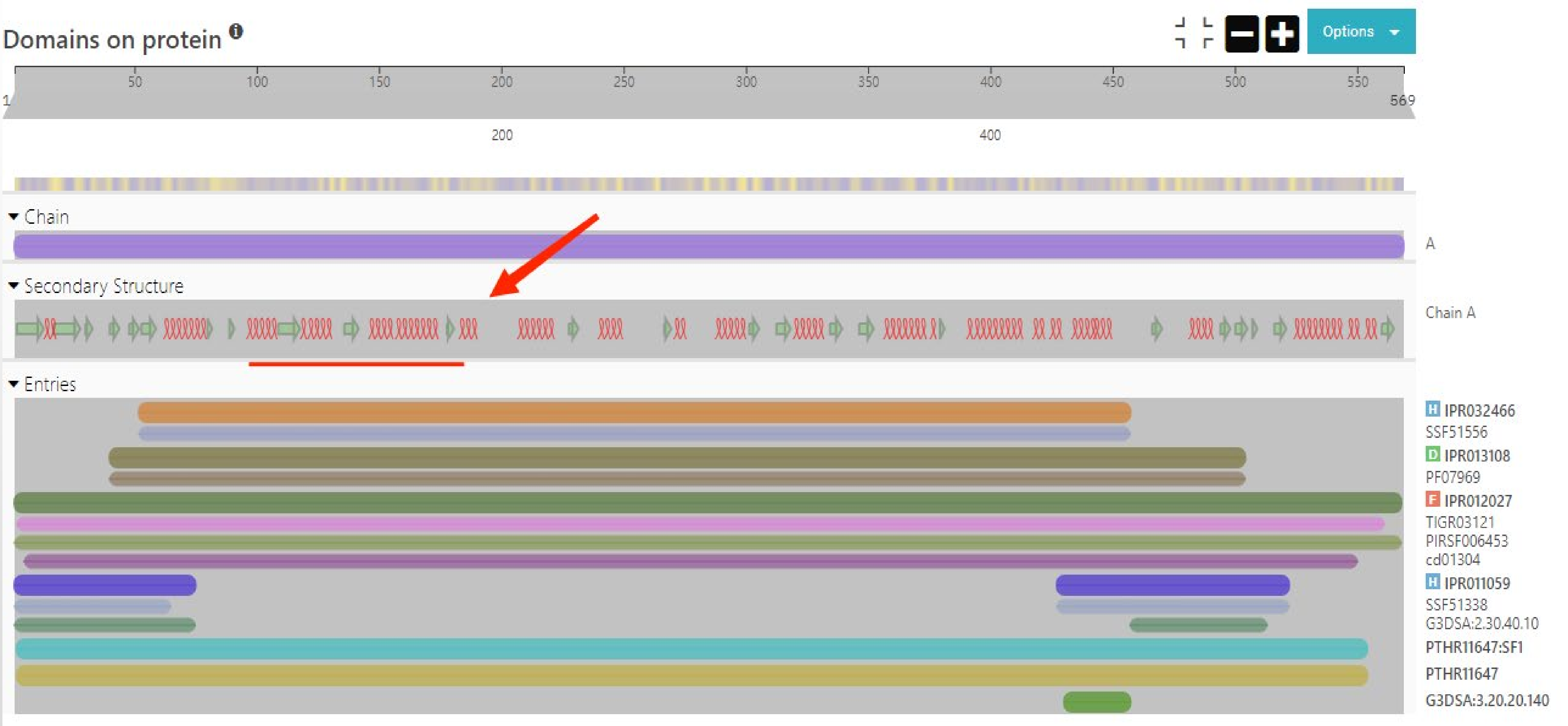
➢ 理化性质分析

表1 Fwd中各亚基的理化性质

subunit	Accession	Number of amino acids	Theoretical pI	(Asp + Glu)%	(Arg + Lys)%	Instability index	GRAVY
fwdA	O74030	569	5.21	12.9	8.8	28.84	-0.223
fwdB		424	5.53	14.2	11.1	37.58	-0.238
fwdC	O74031	270	4.8	14	8.9	34.84	-0.109
fwdD	O74029	130	4.83	13.1	10	30.16	-0.06
fwdF	O74028	349	4.66	16.6	10.6	46.48	-0.122
fwdG	Q1MVD4	82	4.38	15.9	7.3	55.94	0.267

（数据来自ExPASY-Protparam）

➢ 二级结构



(结果来自IntroPro)

➢ 保守结构域分析

fwdA

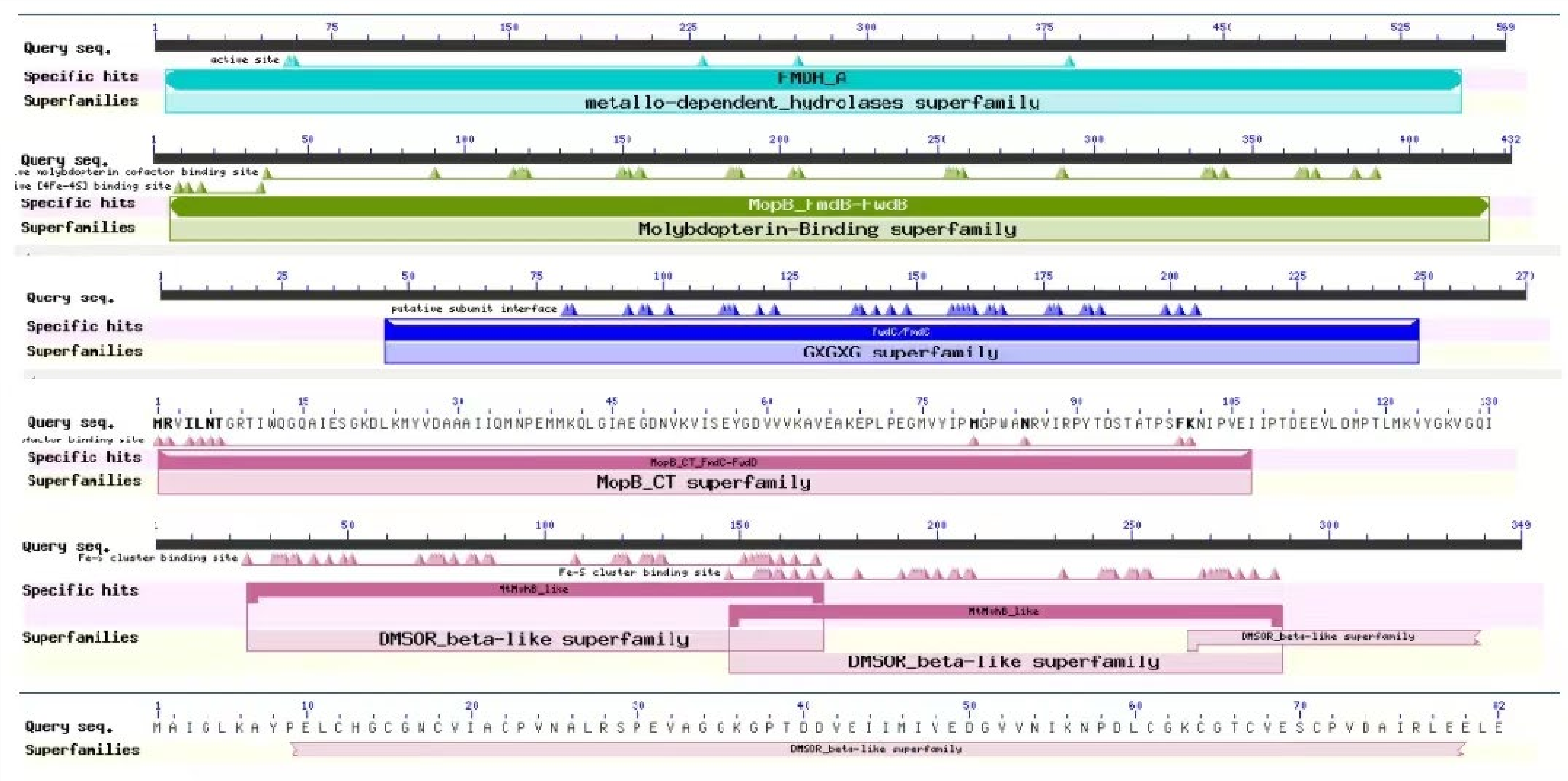
fwdB

fwdC

fwd
D

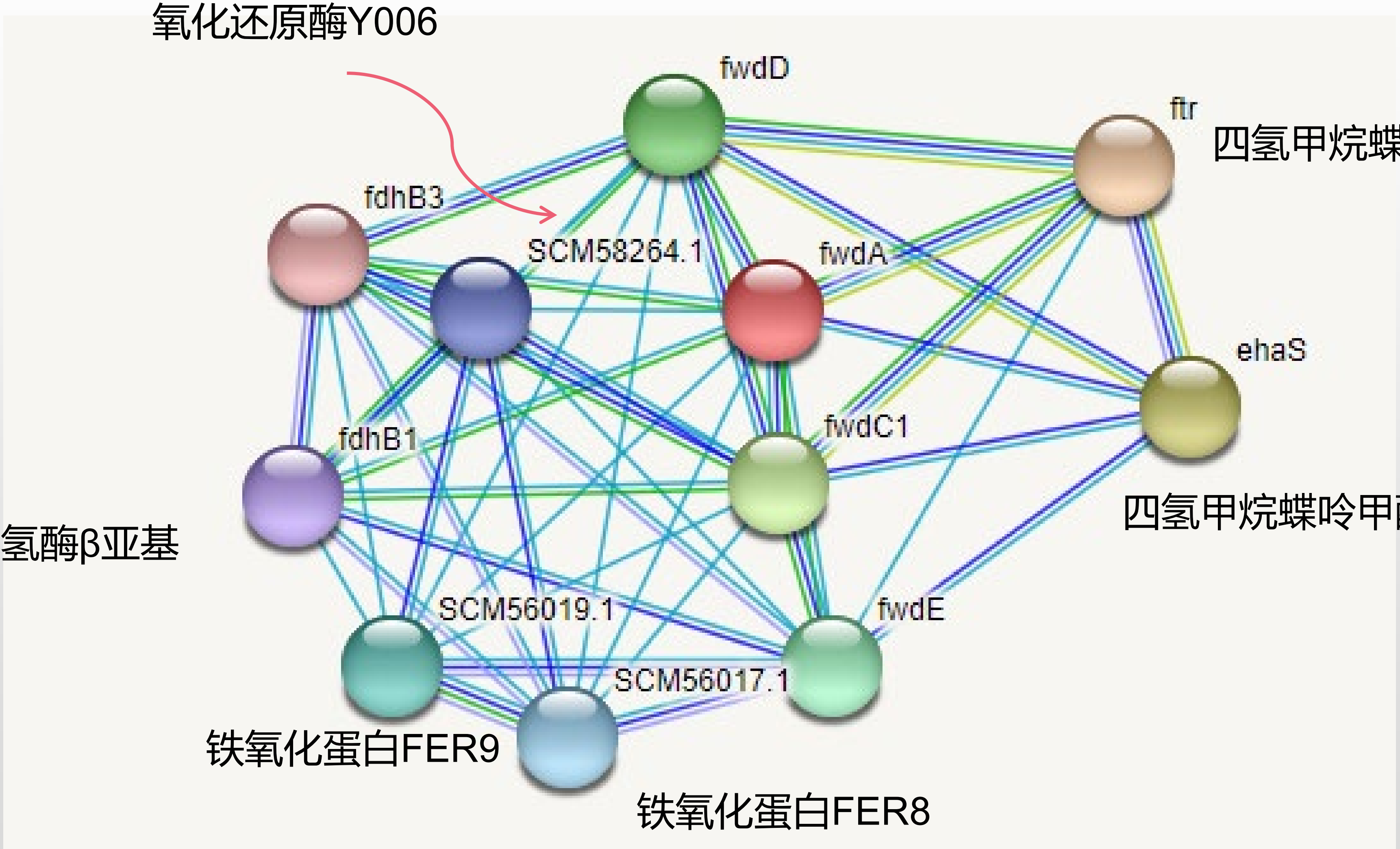
fwd
F

fwdG



(结果来自NCBI CD-search)

蛋白互作



氧化还原酶Y006

四氢甲烷蝶呤甲酰转移酶

四氢甲烷蝶呤甲酰转移酶样蛋白

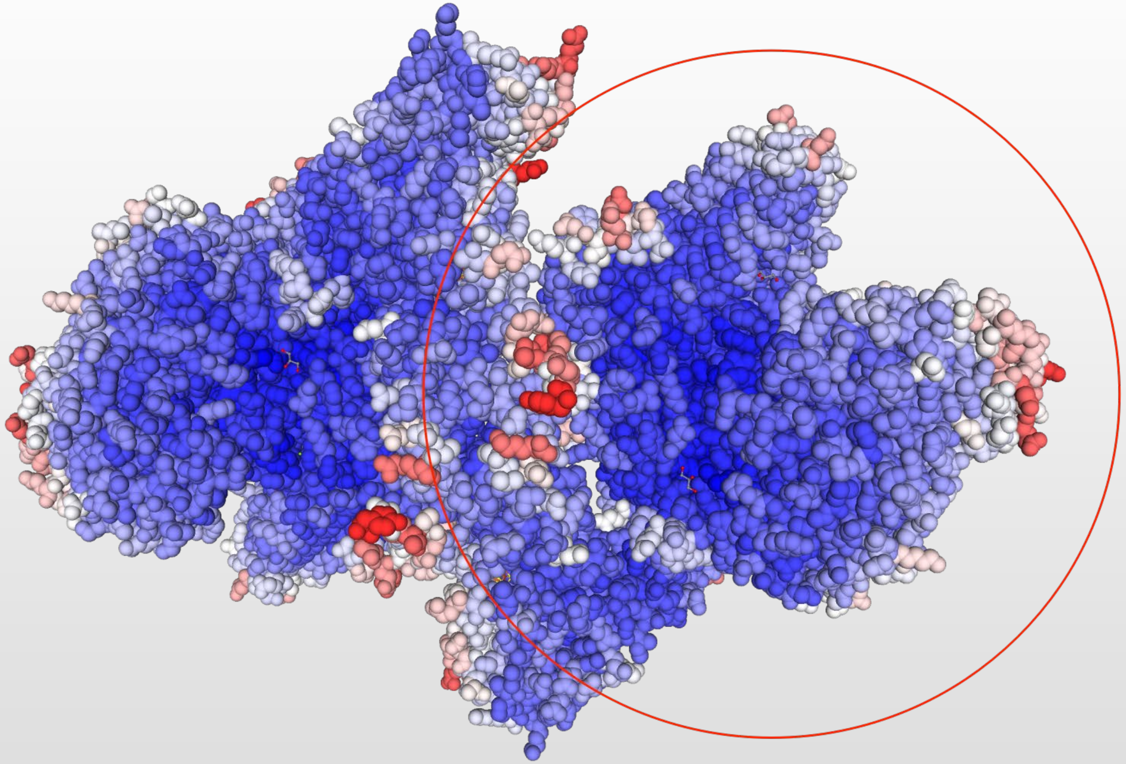
甲酸脱氢酶β亚基

铁氧化蛋白FER9

铁氧化蛋白FER8

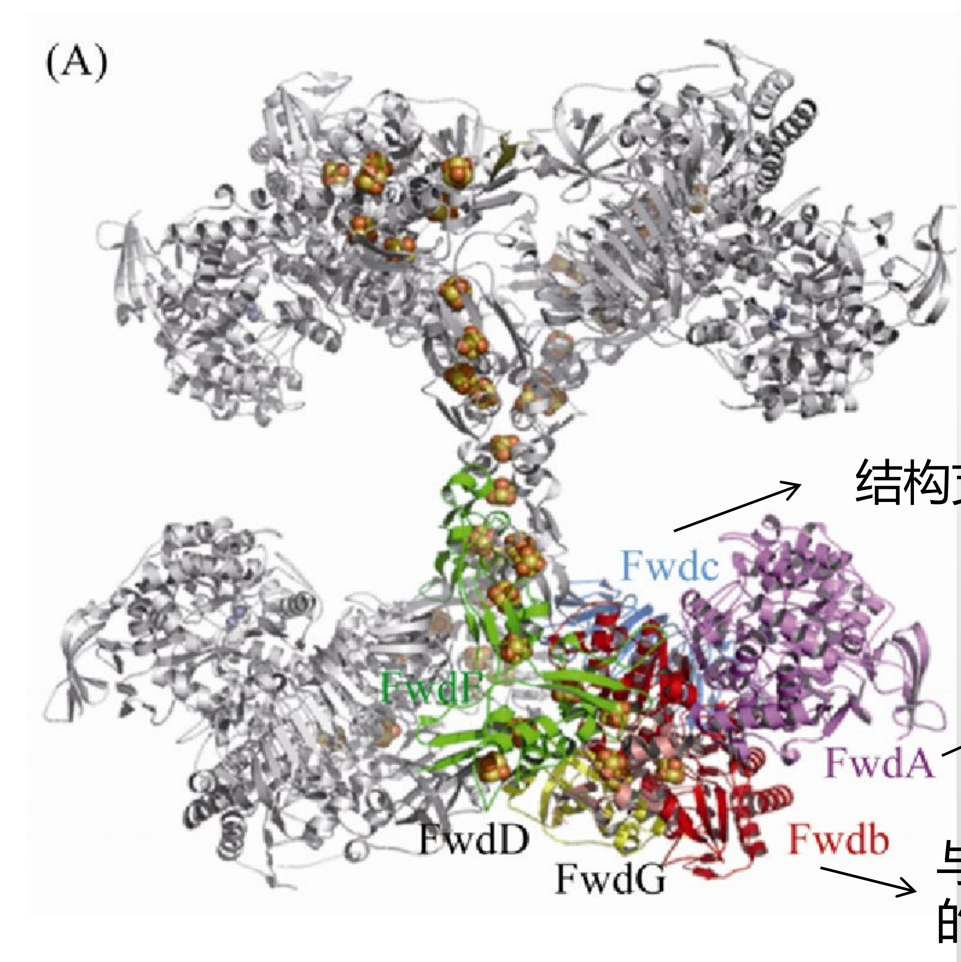
(结果来自STRING)

➢ 三维结构



5T5M（ PDB）：
Fwd FROM METHANOTHERMOBACTER WOLFEII,
X-ray Diffraction, 2.50Å

➢ 各亚基功能



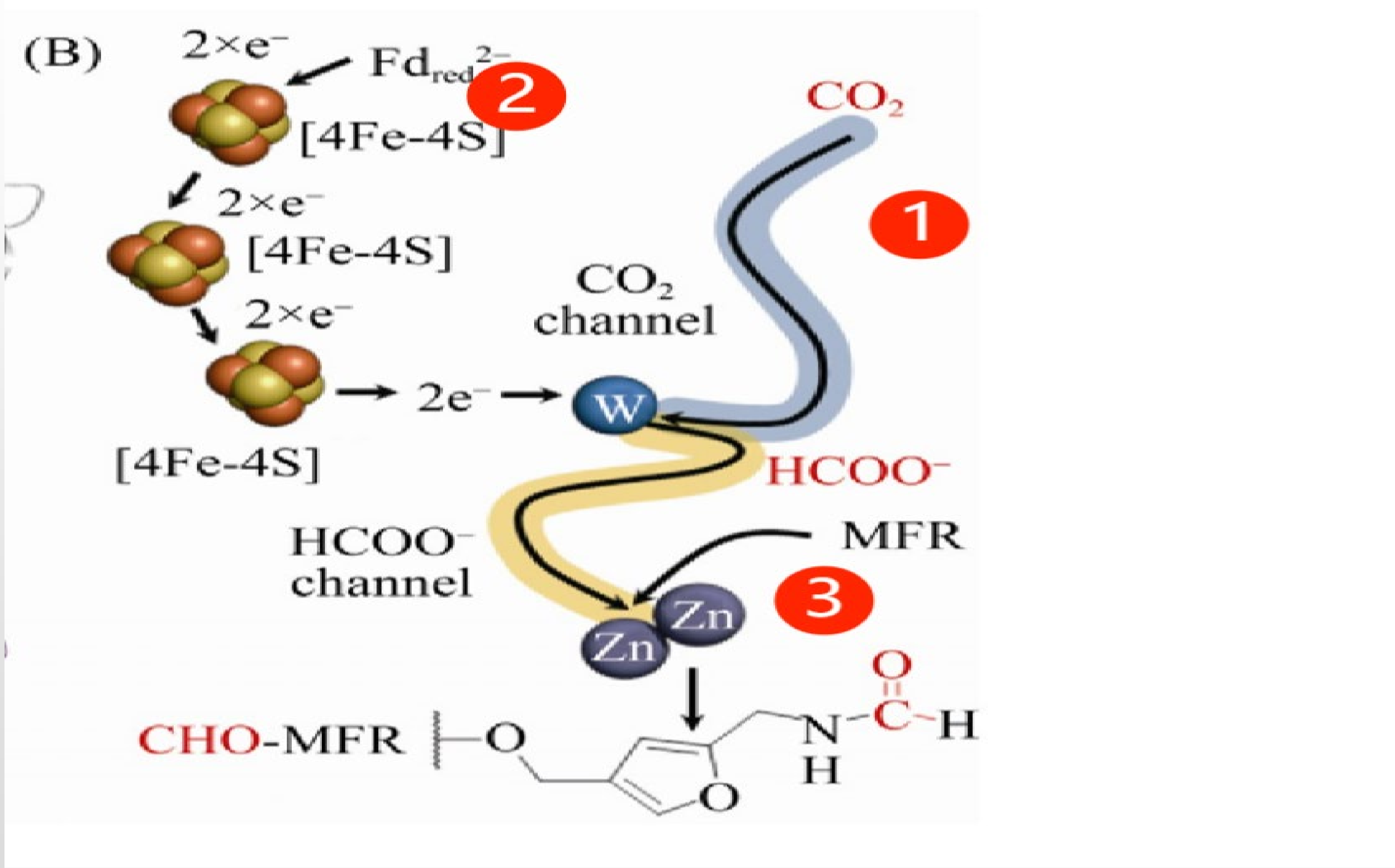
结构支撑

双Zn中心

与D亚基共同组成甲酸脱氢酶的催化活性中心

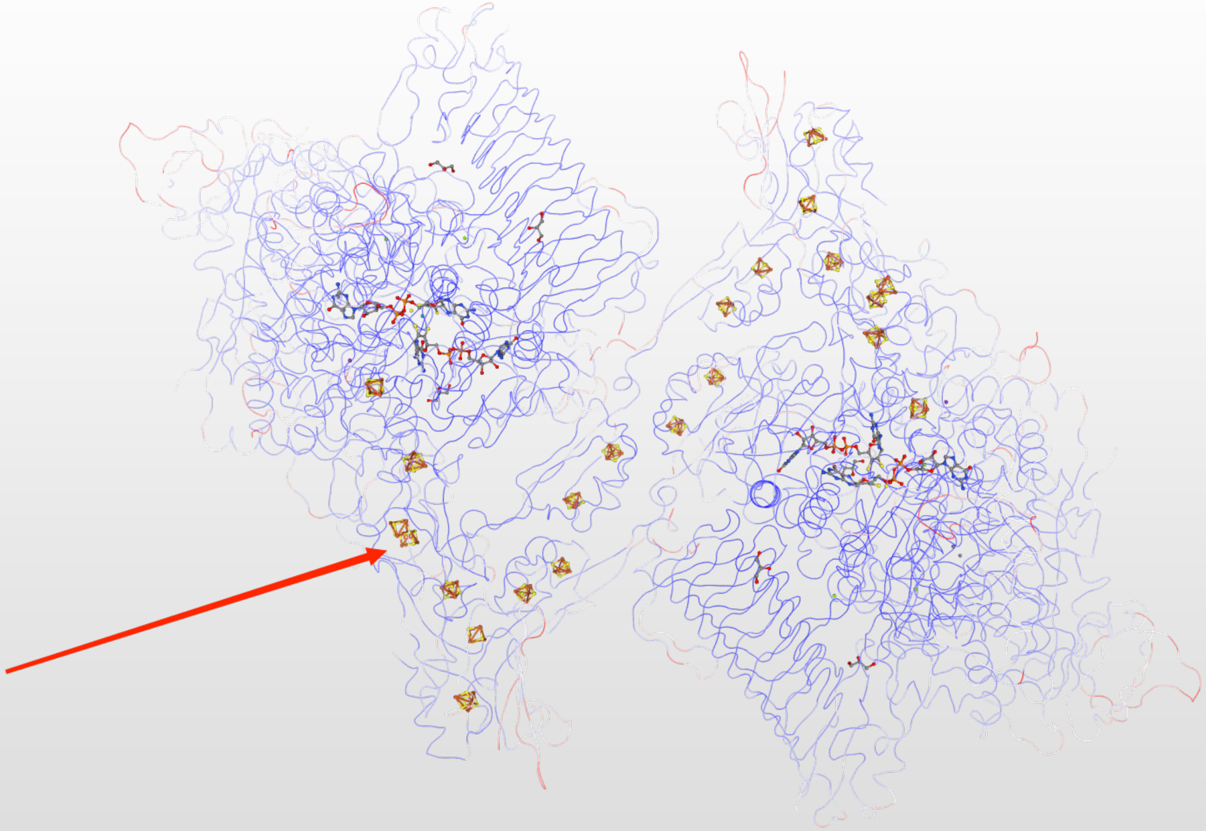
(Wagner T et al,.2016)

➢ 反应途径

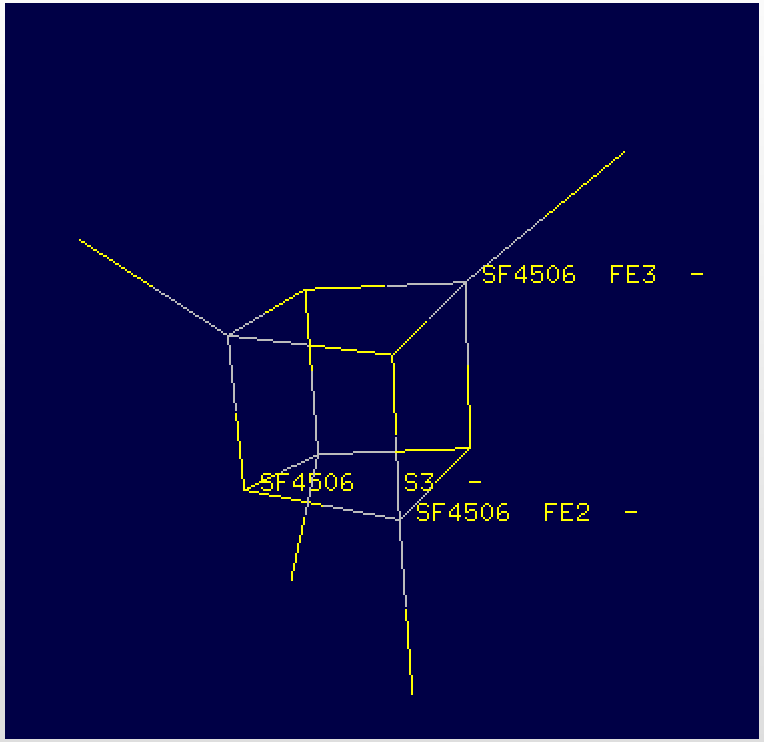


(Wagner T et al,.2016)

➢ 特殊的电子传递体系结构——46个[4Fe-4S]簇



(PDB)

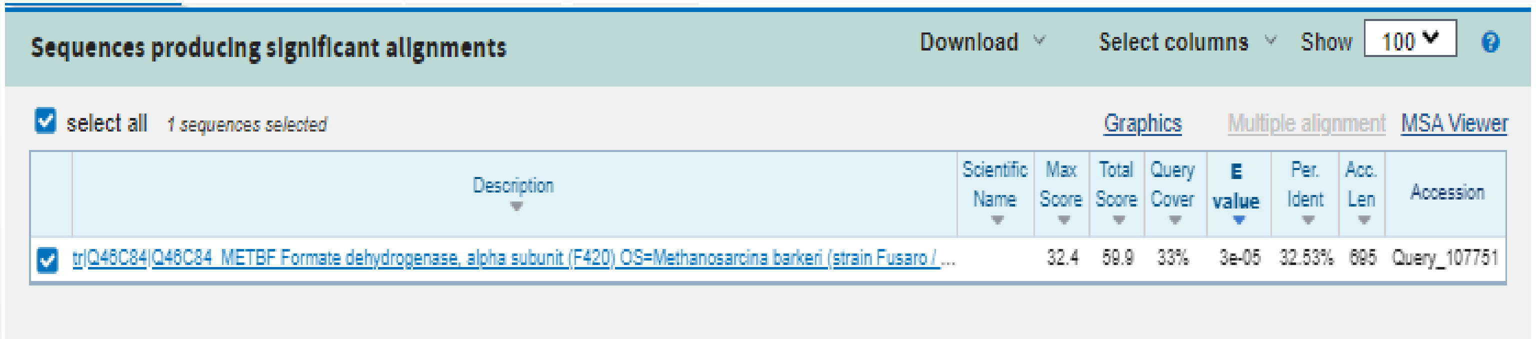


(spdbv)

➤ B、D亚基与甲酸脱氢酶α亚基的序列比对

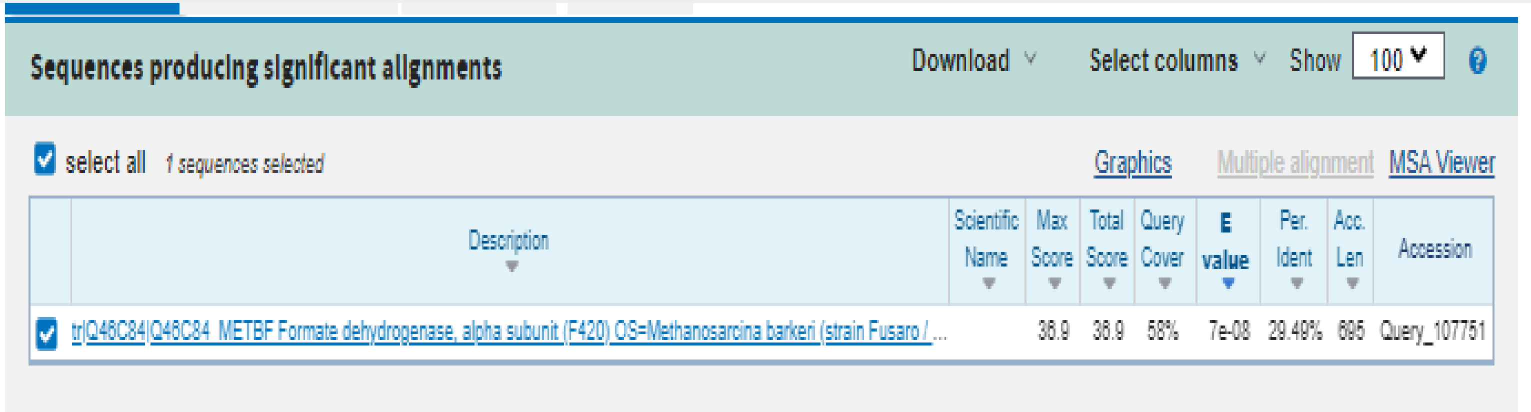
B、D亚基与八叠球甲烷杆菌的甲酸脱氢酶α亚基做序列比对

序列的相似度达到50%左右



☑ select all 1 sequences selected

☑	Description	Scientific Name	Max Score	Total Score	Query Cover	E value	Per. Ident	Acc. Len	Accession
☑	tr|Q46C84|Q46C84_METBF Formate dehydrogenase, alpha subunit (F420) OS=Methanosarcina barkeri (strain Fusaro / ...		32.4	59.9	33%	3e-05	32.53%	695	Query_107751

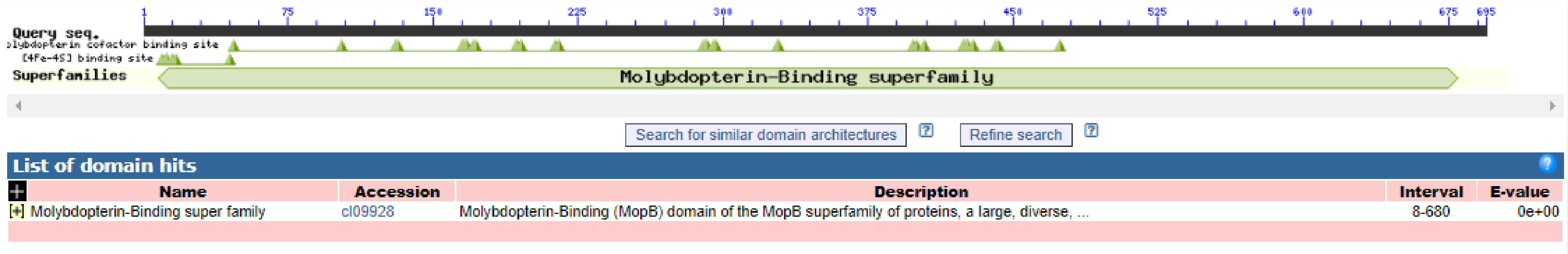


☑ select all 1 sequences selected

☑	Description	Scientific Name	Max Score	Total Score	Query Cover	E value	Per. Ident	Acc. Len	Accession
☑	tr|Q46C84|Q46C84_METBF Formate dehydrogenase, alpha subunit (F420) OS=Methanosarcina barkeri (strain Fusaro / ...		36.9	36.9	58%	7e-08	29.49%	695	Query_107751

（BLAST）

➢ 分析八叠球杆菌FdhH的保守结构域



List of domain hits

Name	Accession	Description	Interval	E-value
[+] Molybdopterin-Binding super family	cl09928	Molybdopterin-Binding (MopB) domain of the MopB superfamily of proteins, a large, diverse, ...	8-680	0e+00

(结果出自NCBI CD-search)

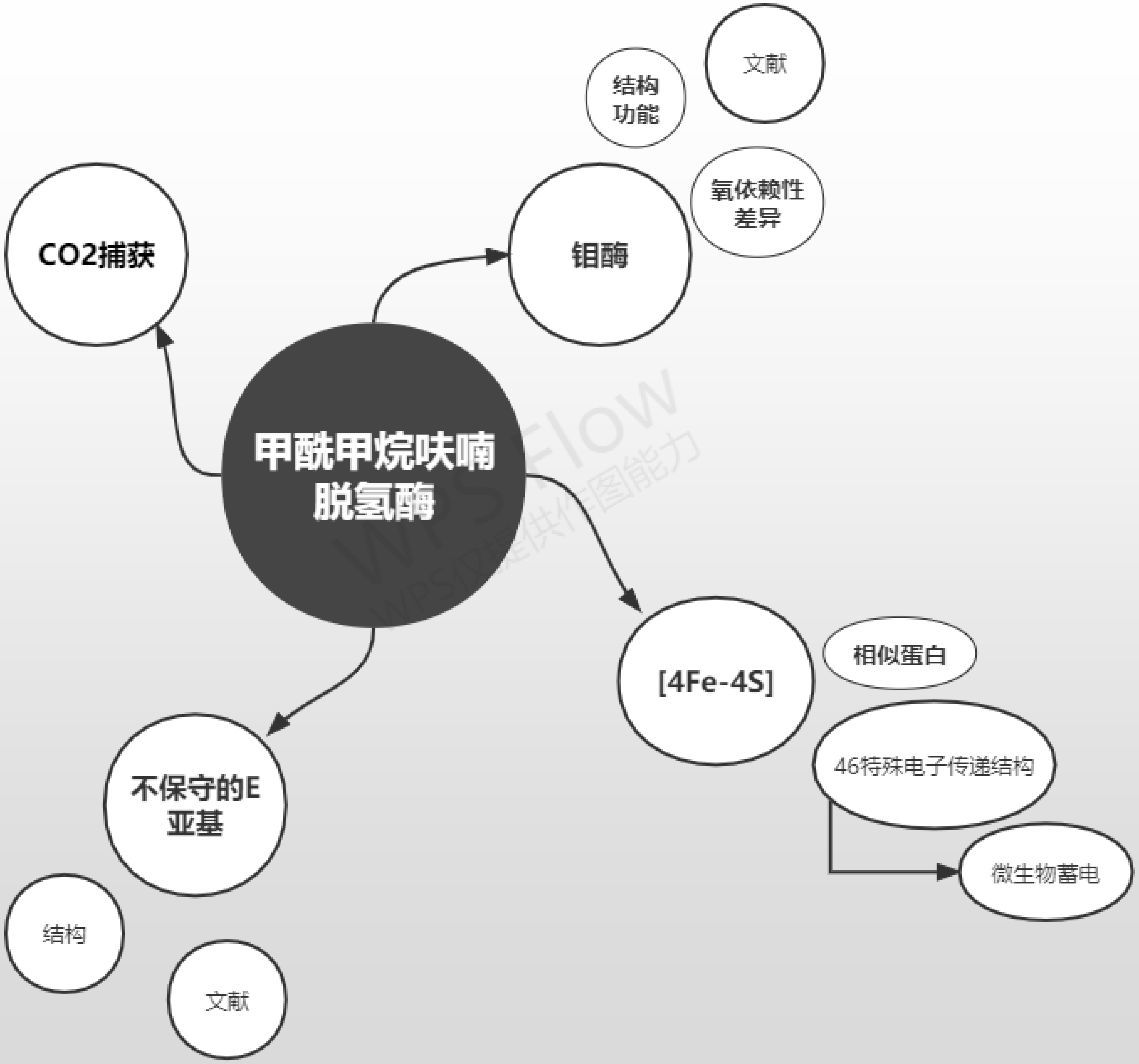
发现它与FwdB同属于钼蝶呤结合超家族

(BLAST)

➢ 总结

- 理化性质，二级结构特征、蛋白间的作用关系；
- 甲酰呋喃脱氢酶的三维结构，了解每一个亚基的基本结构与功能作用；
- 46个[4Fe-4s]簇；
- 大肠杆菌的甲酸脱氢酶单体催化反应只需要1个[4Fe-4s]簇，因此推断甲酰呋喃脱氢酶46个[4Fe-4s]簇还具有其他功能。

➢ 工作计划



- 甲酰甲烷呋喃脱氢酶
  - CO2捕获
  - 钼酶
    - 结构功能
    - 文献
    - 氧依赖性差异
  - [4Fe-4S]
    - 相似蛋白
    - 46特殊电子传递结构
      - 微生物蓄电
  - 不保守的E亚基
    - 结构
    - 文献

感谢聆听

请老师批评指正！