

図1.クエン酸 IMP-1複合体の全体構造

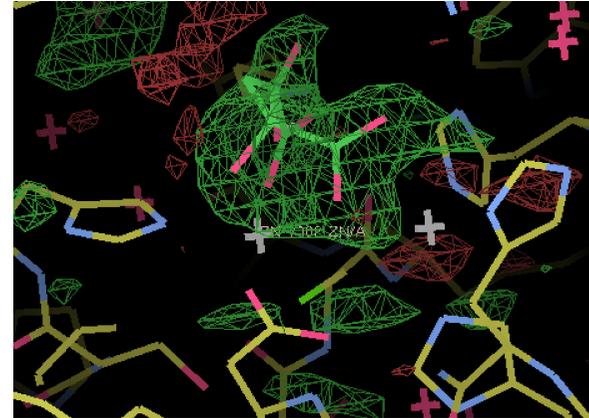


図2. 活性中心構造. 緑は|Fo|-|Fc|3 の電子密度マップ

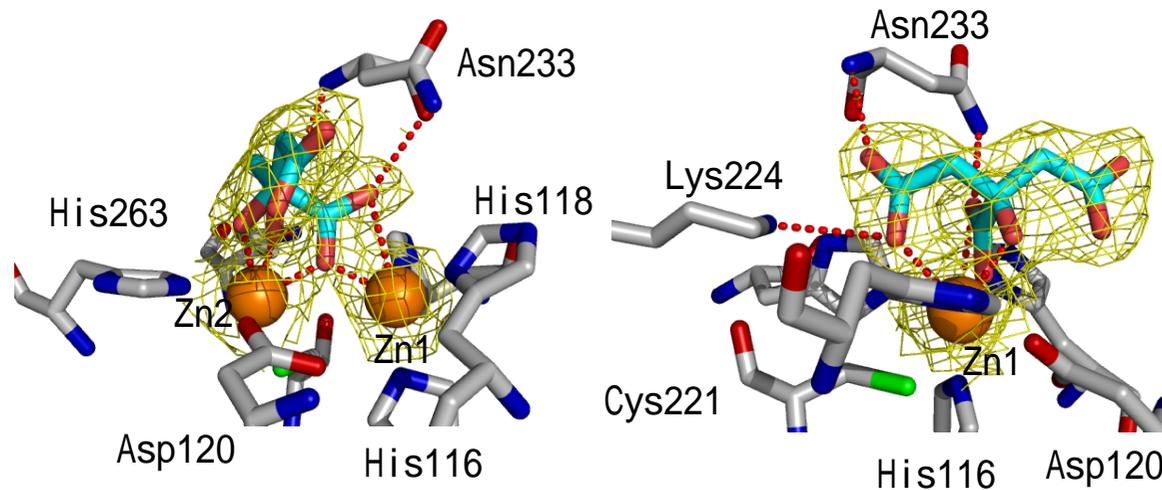


図3. 活性中心に結合するクエン酸配位構造. クエン酸がIMP-1の活性中心にきちんとはまっていることが、電子密度から分かった. クエン酸の1つのカルボキシル基はフリーであった. Zn1は5配位、Zn2は6配位であることが分かった.

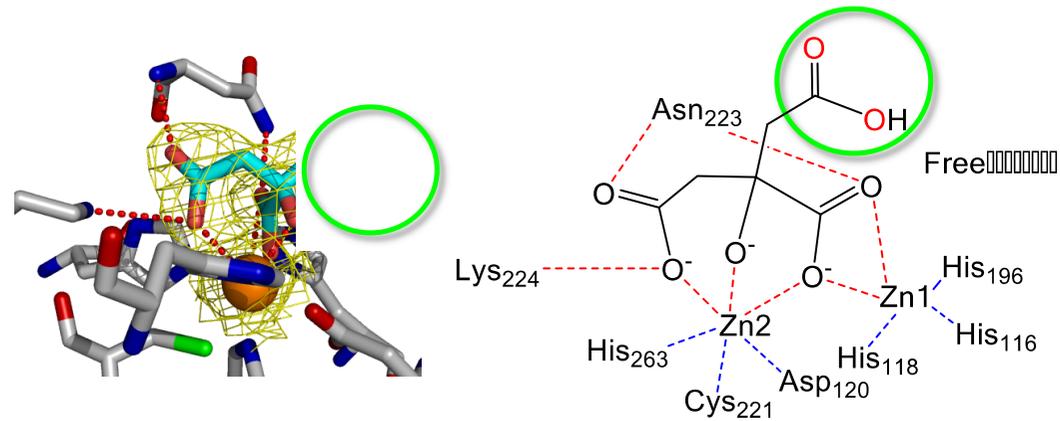


図4. IMP-1 クエン酸結合の模式図

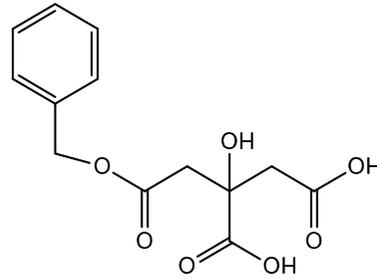


図5. クエン酸モノベンジルエステル

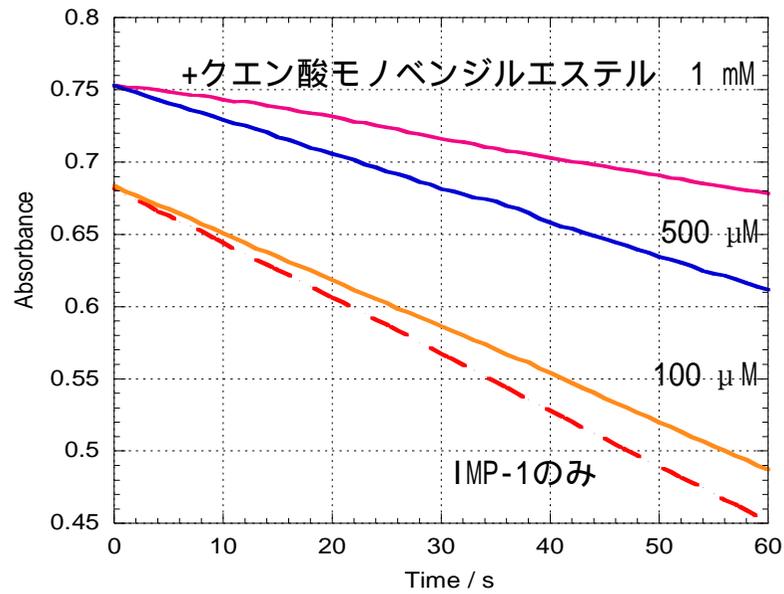


図6. IMP-1によるセファロチン加水分解反応における吸光度(290 nm)の時間変化

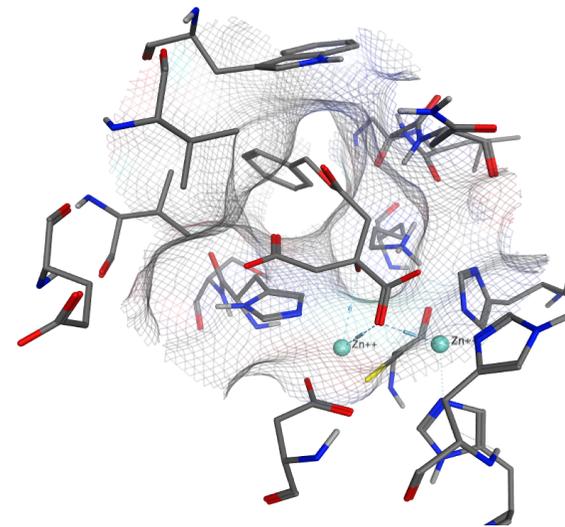


図7. MOEによるクエン酸モノベンジルエステルとIMP-1とのドッキングシュミレーション