

УДК 577.616

А.В.Швецов (2 курс, каф. ЭФ), А.А.Кульминская, н.с. ПИЯФ

ПОИСК СЕЛЕКТИВНЫХ СУБСТРАТОВ И ИНГИБИТОРОВ ДЛЯ γ - ГЛЮКАНАЗЫ И β -
КСИЛАНАЗЫ ИЗ *ASPERGILLUS NIGER*
МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Многие карбогидразы в последнее время используются для нужд биотехнологии. Так, например, α -ксилаза используется для биотехнологических процессов обработки древесины, а именно биоотбеливания целлюлозной массы. В связи с этим появляются задачи получения препаратов фермента без паразитных примесных активностей. Для этого необходимы субстраты строго специфичные для данного фермента, что даст возможность следить за уровнем фермента в процессе культивирования микроорганизмов даже в присутствии ферментов обладающих сходными активностями. Одной из таких задач является определение активности β -ксилазы в грубых ферментативных препаратах в присутствии ферментов имеющих похожую специфичность. Так, было показано, что если в качестве субстрата используется γ -ксилан, то невозможно селективировать активность только γ -ксилазы из-за наличия других ксиландеградирующих ферментов - β -ксилозидазы и γ -глюканазы.

Для решения данной задачи мы попытались на основании имеющихся трёхмерных структур ферментов [1,2] промоделировать процесс связывания различных гипотетических соединений с каждым из ферментов чтобы найти оптимальный селективирующий субстрат специфичный исключительно для γ -ксилазы. Метод, применяемый в данной работе - компьютерное моделирование взаимодействия фермент- субстрат (докинг) с использованием программы AutoDock3 [3]. Основные параметры, по которым оценивается взаимодействие - свободная энергия и константа ассоциации комплекса фермент-субстрат. При подготовке к моделированию были рассмотрены различия трёхмерных структур ферментов в районе активных центров. В результате моделирования взаимодействия с γ -(1-4)-ксилотриозой были найдены отличия в окружении активного центра на которых базировались дальнейшие расчёты. По их результатам были предложены возможные селективные субстраты.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Khademi, S., Zhang, D., Swanson, S.M., Wartenberg, A., Witte, K., Meyer, E.F. Acta Crystallogr., Sect.D 58 pp. 660 (2002).
2. Krengel, U., Dijkstra, B.W. J Mol Biol 263 pp. 70 (1996).
3. Godsel, D.S., Morris, G.M. and Olson, A.J. (1996), J. Mol, Recognition, 9: 1-5.

