

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ СТРУКТУР ИНУЛИНАЗ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ПРОДУЦЕНТОВ

Холявка М.Г., Макин С.В., Артюхов В.Г.

Воронежский государственный университет, биолого-почвенный ф-т,
каф. биофизики и биотехнологии, Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская пл. 1,
тел.: +7(4732)208-586, факс: +7(4732)208-308, e-mail: holyavka@rambler.ru

В настоящее время в исследовании биокатализаторов достаточно актуальны проблемы изучения их структурных особенностей, объяснения механизма катализа, идентификации функциональных групп активных центров. При изучении молекулярных механизмов действия гидролаз, как правило, не достаточно исследования структурно-функциональных свойств биохимическими методами, необходимо осуществление детального анализа белковых макромолекул на всех уровнях их организации. С этой целью нами был проведен сравнительный анализ вторичных структур инулиназ из разных продуцентов. Сведения об аминокислотных последовательностях инулиназ получали в National Center for Biotechnology Information (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez>).

Соотношение упорядоченных и неупорядоченных структур в составе молекул инулиназ определяли с помощью трех программ:

1) CFSSP (Chou-Fasman Secondary Structure Prediction) - самый известный метод предсказания вторичных структур белка. Он основан на вероятностной модели «склонности» аминокислот к расположению в различных конформациях, определенной по частотам их встречаемости в базовом наборе белков. Метод основан на анализе относительной частоты нахождения каждой аминокислоты в составе α -спиралей или β -слоев (<http://www.biogem.org/tool/chou-fasman/>).

2) GOR (Garnier-Osguthorpe-Robson) - метод основан на определении вероятности соответствия количества α -спиралей, β -слоев и неупорядоченных структур параметрам, полученным для известного белка с помощью рентгеновской кристаллографии. Однако, в отличие от CFSSP, метод GOR учитывает не только «склонности» индивидуальных аминокислот, но также и вероятность образования α -спирали или β -слоя с учетом соседних аминокислот (http://npsa-pbil.ibcp.fr/cgi-bin/npsa_automat.pl?page=npsa_gor4.html).

3) SOPMA (Self-Optimized Prediction Method with Alignment) - является улучшенной версией метода SOPM, основанного на методе Левина (http://npsa-pbil.ibcp.fr/cgi-bin/npsa_automat.pl?page=npsa_sopma.html).

Сопоставление вторичных структур инулиназ показало, что соотношение количества α -спиралей, β -слоев и неупорядоченных участков в молекулах инулиназ из различных продуцентов отличается высокой вариабельностью, и поэтому на основе полученных нами данных трудно однозначно выявить зависимость между структурными особенностями фермента и его физико-химическими и кинетическими свойствами. Для этого полученные нами расчеты необходимо сопоставить с данными ИК-спектроскопии, кругового дихроизма, рентгеноструктурного анализа.