

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ПЕРВИЧНЫХ СТРУКТУР ИНУЛИНАЗ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ ПРОДУЦЕНТОВ

Холявка М.Г., Ковалева Т.А., Хрупина Е.А., 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

Инулиназа (КФ 3.2.1.7) расщепляет инулин и другие фруктозосодержащие полимеры, играя важную роль в превращении резервных полифруктозидов типа инулина или левана в мобильную фруктозу, которая является источником углерода и энергии для растений и микроорганизмов. Биотехнологи стали изучать инулиназы из-за перспективы их использования с целью получения сиропов с высоким содержанием фруктозы – перспективного заменителя сахара для больных сахарным диабетом, а также для профилактики кариеса и ожирения.

Целью работы был компьютерный анализ аминокислотных последовательностей инулиназ из различных продуцентов, который создает предпосылки к составлению прогнозов относительно молекулярных особенностей фермента, механизма катализа, функциональных групп активного центра. Детальный анализ белковых макромолекул на всех уровнях их организации в сочетании с классическими подходами биохимии и биофизики позволяет определить структурно-функциональные свойства и молекулярные механизмы действия инулиназ. На сегодняшний день возможность предсказать свойства белка, исходя из аминокислотной последовательности, является одной из главнейших целей современной интегративной биологии.

Сведения о первичных структурах инулиназ получали в National Center for Biotechnology Information (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez>), выравнивание аминокислотных последовательностей проводили при использовании программного пакета BioEdit.

Установлено, что основное количество гомологичных звеньев представлено остатками Gln, Asn и Asp. Эти аминокислоты, вероятно, ответственны за активное взаимодействие белковой макромолекулы с молекулами воды, обеспечивая хорошую растворимость фермента. Карбоксильные группы боковых радикалов Asp и Glu, входящих в состав активных центров инулиназ, могут выполнять роль контактных групп для молекул субстрата, а также осуществлять кислотно-основной катализ, оказывая влияние на полярность расположенных по соседству с ними связей и групп фермент-субстратного комплекса или вызывая смещение электронной плотности путем образования водородных связей. Сопоставление первичных структур инулиназ показало, что частота замен остатков на протяжении полипептидных цепей отличается высокой вариабельностью. Построено филогенетическое дерево инулиназ из различных источников. Высокая степень гомологии характерна для ферментов из *Aspergillus awamori*, *A. niger* и *A. ficuum*; интересно, что инулиназа из *A. fumigatus* стоит эволюционно гораздо дальше от них. Относительно небольшим родством обладают эндо- и экзоинулиназы. Самые существенные отличия обнаружены между инулиназами из *Aspergillus fumigatus* и *Arthrobacter* sp. S37.