

ВНУТРЕННИЕ ПОЛОСТИ, ТУННЕЛИ И ПОРЫ В СОСТАВЕ МОЛЕКУЛ МОНОМЕРОВ И ДИМЕРОВ БЕТА-ФРУКТОЗИДАЗЫ ИЗ THERMOTOGA MARITIMA

Сакибаев Ф.А., Холявка М.Г., Артюхов В.Г.

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет 394018, г. Воронеж,
Университетская пл., д. 1 Телефон: +7(473)2208586 Факс: +7(473)2208755

Гетерогенные катализаторы на основе гликолитических ферментов имеют широкие перспективы применения в пищевой промышленности. Энзимы данной группы могут функционировать как в форме мономеров, так и в составе димерного комплекса. Известно, что конформация биокатализаторов во многом определяет их активность. В связи с этим возникает необходимость в изучении особенностей пространственной организации ферментов.

Объектом исследования является β -фруктозидаза (1W2T) из *Thermotoga maritima*. Расчет параметров пор, туннелей и полостей осуществляли в программном обеспечении Mole 2.13.9.6. Под «полостью» понимали свободное замкнутое пространство внутри глобулы фермента, не сообщающееся с поверхностью молекулы. Под «порой» – свободное пространство внутри глобулы, сообщающееся с ее поверхностью только через одно отверстие. Под «туннелем» мы подразумевали сквозное отверстие в белковой глобуле, т.е. свободное пространство внутри молекулы, сообщающееся с ее поверхностью через два и более отверстий.

В составе мономера β -фруктозидазы обнаружено 9 внутренних полостей, большая часть которых локализована в области некаталитического домена. Количество туннелей в молекуле фермента также составляет 9, однако, данные структуры локализованы преимущественно в области каталитического домена. Наличие пор в составе мономера β -фруктозидазы не выявлено.

При формировании димерного комплекса исследуемой нами гликозидазы образуют две новых внутренних полости в области контакта субъединиц; наблюдаются также изменения локализации и пространственной организации остальных структур данного типа. Количество туннелей в составе димера β -фруктозидазы составляет 14: из них 8 в одной субъединице, 3 в другой, и 3 в области контакта. Это может свидетельствовать об отличиях конформационных состояний субъединиц в димерном комплексе исследуемого гликолитического фермента. Кроме того, наблюдаются значительные изменения в локализации и составе структур данного типа, что указывает на вероятные значительные конформационные перестройки в энзиме в ходе димеризации. В димерном комплексе β -фруктозидазы формируется 5 пор в области контакта субъединиц.

На основании вышеизложенного можно сделать вывод о том, что в процессе димеризации молекулы β -фруктозидазы претерпевают значительные конформационные перестройки, что необходимо учитывать при проектировании производственного процесса с использованием данного энзима.