

Секция «Биоинженерия и биоинформатика»

Моделирование структуры ксиланазы грибов рода *trichoderma*

Сатаева Диляра Алиевна

Студент

Казанский государственный университет им. В.И. Ульянова-Ленина,

Биолого-почвенный факультет, Казань, Россия

E-mail: dily_91@mail.ru

Ксиланы являются наиболее распространенными гемицеллюлозами, составляют более 30 % сухого веса растительной биомассы и занимают второе место по распространенности после целлюлозы. В настоящее время ксиланазы нашли широкое применение в пищевой промышленности для повышения выхода и качества продукции в производствах хлеба, соков, вин, пива, спирта, растительного масла, растворимого кофе и др.

Для предотвращения затрат, связанных с постановкой дорогостоящих экспериментов, в последнее время широкое распространение приобретает метод компьютерного моделирования и прогнозирования пространственной трёхмерной структуры данных ферментов, что в значительной мере сокращает время проведения исследований и средства, необходимые для их постановки.

Цель работы: смоделировать пространственную структуру ксиланазы.

Исходя из поставленной цели, перед нами встает ряд задач:

- изучить формат PDB;
- по аминокислотной последовательности построить пространственную структуру ксиланазы при помощи методов построения трехмерной структуры по гомологии и по принципу ab initio;
- провести сравнительный анализ полученных моделей.

ВЫВОДЫ

По результатам проделанной работы был сделан следующий вывод: модель, полученная с помощью программы Robetta, в большей степени удовлетворяет естественной модели ксиланазы. Такое заключение было сделано на основе сравнения полученных моделей со структурой ксиланазы *Trichoderma harzianum*. Но мы не можем с полной уверенностью говорить об этом, поскольку структура ксиланазы *Trichoderma harzianum* не является универсальной и безусловно отличается от структуры исследуемой нами ксиланазы, и поэтому сравнивать их между собой не совсем правильно. Помимо этого на исследуемую структуру, по-видимому, влияют и другие силы окружающих её молекул, что в данной работе не учитывалось.

Исходя из этого, следует учитывать, что данный метод не является универсальным и требует дальнейших исследований.

Литература

1. Миронов А.А. Лекции по биоинформатике. МГУ. 2011.
2. David W. Mount. Bioinformatics: Sequens and Genom analysis. 2005, September.
3. World Wide Protein Data Bank – официальный сайт

Иллюстрации

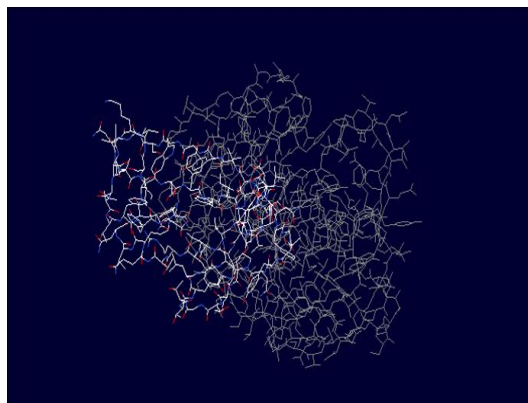


Рис. 1: Сравнение модели 1, полученной с помощью Geno3d (справа) с ксиланазой *Trichoderma harzianum* (слева)

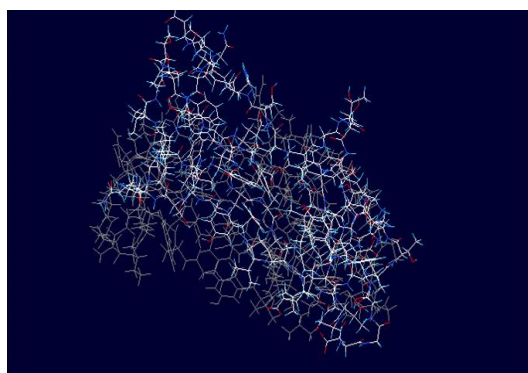


Рис. 2: Сравнение модели 1 (Robetta) (слева) с ксиланазой *Trichoderma harzianum* (справа)