



**Лаборатория Биокатализа и  
Биотрансформаций  
НИИ ФХБ им. А.Н.Белозерского**  
Руководитель – д.х.н., проф. Витас Швядас  
[vytas@belozersky.msu.ru](mailto:vytas@belozersky.msu.ru), тел. 939-23-55  
Лабораторный корпус Б, комната 622

### **Изучение возможностей функциональной классификации ферментов с помощью коротких аминокислотных фрагментов - мотивов**

Лаборатория биокатализа и биотрансформаций специализируется на исследовании и оптимизации свойств ферментативных систем, имеющих прямое промышленное применение. Отличительной особенностью работы является многосторонний подход к решению задач современной биотехнологии за счет эффективного комбинирования экспериментальных методов исследования и молекулярного моделирования. Среди приоритетных направлений развития лаборатории — разработка способов эффективного приложения методов биоинформатики и сравнительной геномики для получения информации о свойствах, механизмах действия ферментов, а также возможностях их оптимизации.

Предсказание функции фермента по его первичной структуре является одним из наиболее приоритетных направлений биоинформатики. Традиционный подход к этой проблеме приписывает функцию белков большим структурным фрагментам — доменам, а также отдельным аминокислотам, расположенным в стратегически важных точках. С другой стороны, поиск коротких аминокислотных последовательностей, мотивов, присутствие которых в последовательности может служить индикатором определенной активности, становится все более перспективным и может лечь в основу нового функционального анализа ферментов. Авторы алгоритма MEX (motif extraction) предлагают использовать его для автоматического поиска набора коротких мотивов по 6-12 аминокислот, уникальных для каждой ветви классификации EC (Enzyme Commission). Утверждается, что эта методика способна правильно определять активность подавляющего большинства ферментов. Эти результаты выгодно отличают MEX от его аналогов как по эффективности предсказаний, так и по простоте применения, поскольку не требует входного выравнивания. Работа предполагает проведение анализа имеющихся на настоящий момент методик определения функционально значимых мотивов и оценке границ их применимости. Анализ показал, что найденные мотивы чаще всего включают аминокислоты активного центра и центра связывания, а также остатки, входящие в состав реакционного кармана. В связи с этим

планируется применение наиболее перспективных алгоритмов на ферментах семейства пенициллинацилаз, а также других амидазах, катализирующих гидролиз амидной связи, но использующих другой механизм. Ожидается, что такое сравнение позволит определить функционально значимые участки ПА. Предполагается найти уникальный набор мотивов, необходимых и достаточных для идентификации пенициллинацилазной активности. Полученные результаты могут быть использованы как альтернативный способ поиска гомологов ПА, а также для правильного понимания молекулярных механизмов регуляции активности и стабильности ПА.

Масштаб и глубина исследования зависят исключительно от подготовки и научных амбиций исполнителя. Приветствуется знание органической химии, биоинформатики, умение программировать. Обязательное требование к кандидатам - техническое знание английского языка для чтения профильной литературы.

Научные руководители

д.х.н., проф. Витас Швядас

аспирант Дмитрий Суплатов, [genesup@belozersky.msu.ru](mailto:genesup@belozersky.msu.ru),

тел. 939-44-84, Лабораторный корпус Б, комната 622