



**ZBORNÍK PRÍSPEVKOV**  
**3. KONFERENCIE**  
**CENTRA EXCELENTNOSTI**

Aplikácia OMICS nástrojov v štúdiu vzniku chorôb a ich  
prevencie



Chemický ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, Bratislava

30. november 2022

**Recenzent**

RNDr. Jana Bellová, PhD.

[chemjbel@savba.sk](mailto:chemjbel@savba.sk)

**Editor**

Mgr. Mária Šedivá, PhD.

[chemsedm@savba.sk](mailto:chemsedm@savba.sk)

Ing. Mária Kopáčová

[chemmari@savba.sk](mailto:chemmari@savba.sk)

**ISBN 978 – 80 – 971665 – 4 - 0**

# Elektrostatický potenciál povrchov exoglykozidhydroláz rodiny 28

Barbora Stratilová, Sergej Šesták, Stanislav Kozmon, Kristína Vadinová, Eva Stratilová

Chemický ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, SK-84538 Bratislava

## Úvod

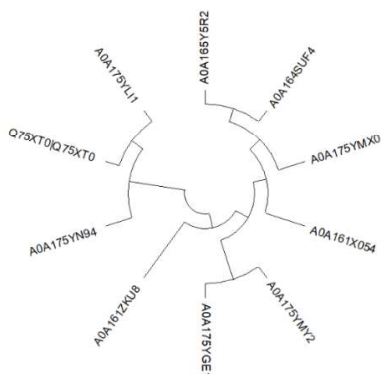
V prípade enzýmov, ktoré katalyzujú hydrolyzu polysacharidov zložených z kyslých jednotiek, môže zohrávať významnú úlohu v špecificite týchto enzýmov elektrostatický potenciál ich povrchu. Takýmito enzýmami môžu byť napr. izoformy exoglykozidhydroláz (exoGH) rodiny 28 [1]. Prítomnosť viacerých izoformiem sa zistila už v starších prácach, ktoré sa zaoberali charakterizáciou týchto enzýmov na úrovni stanovenia enzymovej aktivity v surových proteínových extraktoch [2,3]. Štruktúry enzýmov sa vybrali na základe prítomnosti esenciálnych aminokyselín nevyhnutných pre katalytické vlastnosti tejto skupiny bioinformatickou analýzou proteínov [4] v databáze UniProtKB [5]. Z desiatich vybraných štruktúr boli zatiaľ dokázané predpokladané glykozidhydrolázové aktivity pre dva proteíny, A0A161ZKU8 [6] a Q75XT0.

## Materiál a metódy

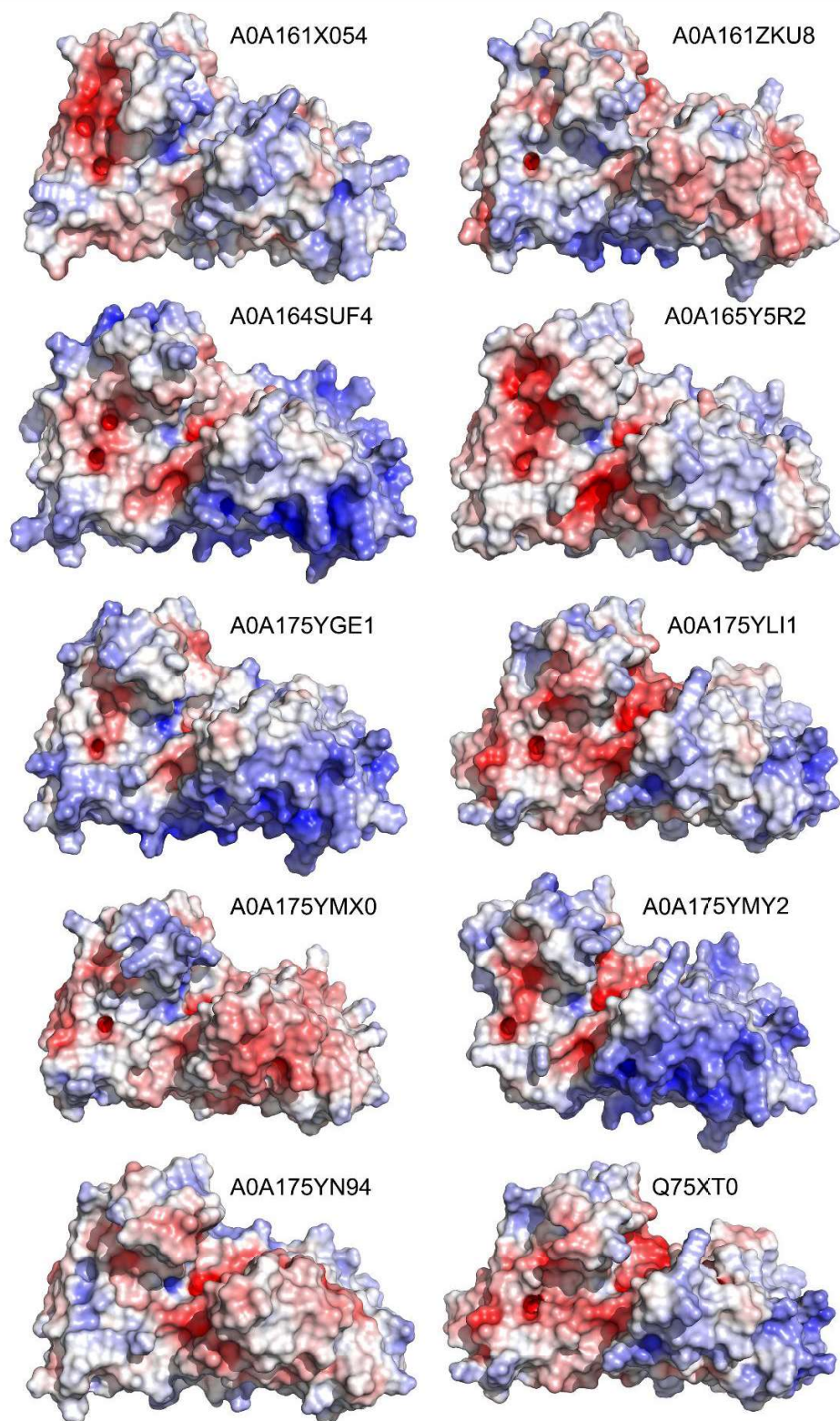
Proteínové štruktúry desiatich čiastočne charakterizovaných a potenciálnych izoformiem exoGH 28 boli vybrané na základe štúdie Stratilovej a kol [4]. Fylogenetický strom bol vytvorený v programe MEGA v7.0.26 [7] a Clustal Omega [8]. Ako modely ich terciárnych štruktúr boli použité príslušné 3D modely z databázy AlphaFold [9]. Elektrostatický potenciál ich povrchov bol zobrazený v programe PyMol [10].

## Výsledky a diskusia

Fylogenetický strom vytvorený pre dve štruktúry s potvrdenou aktivitou exoglykozidhydroláz rodiny GH 28 (A0A161ZKU8 a Q75XT0) a ďalších osem štruktúr, ktoré by mohli mať tieto aktivity na základe výsledku bioinformatickej analýzy ukázal, že tieto štruktúry tvoria dve fylogenetické skupiny (**Obr. 1**).



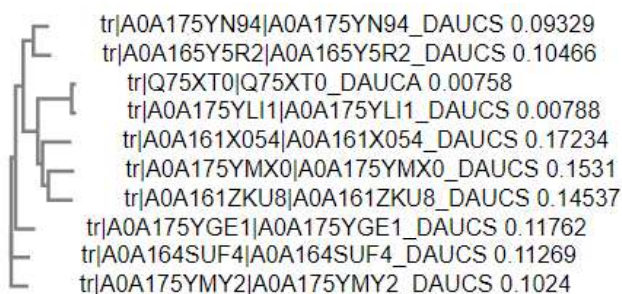
**Obr. 1.** Fylogenetický strom čiastočne charakterizovaných (A0A161ZKU8, Q75XT0) a potenciálnych izoformiem exoGH 28 vytvorený programom MEGA [7].



**Obr. 2.** Elektrostatický potenciál povrchov čiastočne charakterizovaných (A0A161ZKU8 a Q75XT0) a potenciálnych izoforiem exoGH 28

Zobrazenie elektrostatického potenciálu povrchov modelov z AlphaFold databázy poukázalo na výrazné rozdiely potenciálov jednotlivých štruktúr, ktoré zahrňovali aj aktívne miesta enzýmov (**Obr. 2**).

Porovnaním elektrostatických potenciálov povrchov štruktúr a ich zaradením do fylogenetického stromu vytvoreného programom MEGA sme nezistili medzi nimi žiadnu koreláciu. Z tohto dôvodu sme vytvorili aj fylogenetický strom programom Clustal Omega, ktorý vyjadroval vzťah medzi povrchmi podstatne lepšie (**Obr. 3**).



**Obr. 3.** Fylogenetický strom čiastočne charakterizovaných (A0A161ZKU8, Q75XT0) a potenciálnych izoformami exoGH 28 vytvorený programom Clustal Omega [8].

### Záver

Exoglykozidhydrolázy rodiny GH 28 sa vyskytujú v podobe viacerých izoformami, ktoré vykazujú významné rozdiely v elektrostatických potenciáloch svojich povrchov, pričom sa tieto rozdiely dajú pozorovať aj v aktívnych miestach enzýmov. Vplyv týchto rozdielov na viazanie a hydrolyzu nabitých polysacharidov bude predmetom ďalšieho výskumu.

### Podakovanie

Tento príspevok vznikol vďaka podpore v rámci Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt: Štúdium štruktúrnych zmien komplexných glykokonjugátov v procese dedičných metabolických a civilizačných ochorení, ITMS: 313021Y920, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

### Literatúra

- [1] Drula E., Garron M.-L., Dogan S., a kol. (2022) *Nucleic Acid. Res.* 50, p. D571.
- [2] Stratilová E., Markovič O., Dzúrová M. et al. (1998) *Biologia, Bratislava* 53, p. 731.
- [3] Stratilová E., Dzúrová M., Malovíková A. et al. (2005) *Z. Naturforsch.* 60c, p. 899.
- [4] Stratilová B., Horváthová A., Kozmon, S., et al. (2021) *Zborník ŠVK, Prif UK*, p. 767.
- [5] The UniProt Consortium (2019) *Nucleic Acid. Res.* 47, D506.
- [6] Stratilová B., Šesták S., Lukáčová V., a kol. (2022) *Zborník ŠVK, Prif UK*, p. 949.
- [7] Kumar S., Stecher G., Tamura K. (2016) *Mol. Biol. Evol.* 33, p. 1870.
- [8] Sievers F., Wilm A., Dineen D.G. a kol. (2011) *Mol. Sys. Biol.* 7, čl. 539.
- [9] Varadi M., Anyango S., Deshpande M. a kol. (2022) *Nucleic Acid. Res.* 50, D439.
- [10] The PyMOL Molecular Graphics System, Version 1.2r3pre, Schrödinger, LLC.