

Ing. PETR KOLENKO, Ph.D.  
petr.kolenko@fjfi.cvut.cz

# V hlavní roli enzymy |

## BIOCEV: nový partner pro ČVUT

**Klíčem k pochopení vlastností každého materiálu je jeho struktura. U makroskopických objektů určuje vnitřní struktura především jejich mechanické vlastnosti, u makromolekulárních systémů i jejich funkci. V nově založené Laboratoři strukturní biologie na Katedře inženýrství pevných látek Fakulty jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT se studenti i pracovníci zabývají analýzou struktur enzymů, které vykazují potenciál pro aplikaci v nových biotechnologických postupech.**

Enzymy hrají ústřední roli ve všech buněčných procesech. V jistém smyslu patří mezi „smart“ materiály, jejichž průmyslové použití je obecně velmi dobře rozvinuto. Díky své unikátní struktuře pomáhají významně usnadňovat (katalyzovat) chemické reakce. Obecně se jedná o makromolekuly s mnoha tisíci různými atomy. Pro správný průběh každé enzymové reakce je zcela zásadní poloha skupin několika atomů tvořících takzvané aktivní místo. Enzymy a jejich vlastnosti jsou používány v oborech od potravinářství, výroby senzorů a čipů až po medicínu. Právě na tyto obory hodlá laboratoř ve svém výzkumu cílit.

Možná nás napadne otázka: Proč se na FJFI vyskytuje takto biologicky orientovaný výzkum? Odpověď je velice jednoduchá. Správné nastavení a obzvláště vyhodnocení difrakčního experimentu na zdroji rentgenového záření vyžaduje matematické a fyzikální vzdělání. Data o velikostech desítek gigabajtů je třeba redukovat na použitelný signál o velikosti v řádu megabajtů a následně upřesňování struktury je ve velké míře výpočetní proces. Zkrátka, strukturní biologie je mezioborová disciplína, u které fyzikální a matematická stránka hraje významnou úlohu. Druhým důvodem je využití „inteligentních“ biomolekul jako aktivních prvků ve funkčních strukturách, jakými jsou například optické chemické senzory.

Stanovení struktury enzymů je obvykle zdoluhavý a náročný proces. Hlavní metodou určování struktur enzymů je monokrystalová rentgenová difrakce. Celý proces zahrnuje následující kroky: produkce enzymu a jeho krystalizace, testování získa-

ných monokrystalů a sběr difrakčních dat pomocí zdroje rentgenového záření, zpracování difrakčních dat, řešení fázového problému, upřesňování struktury a kontrola geometrie výsledného modelu. Díky možnostem využití výpočetní kapacity na katedře je v současné době lze samostatně pracovat na následných krocích počínaje zpracováním difrakčních dat.

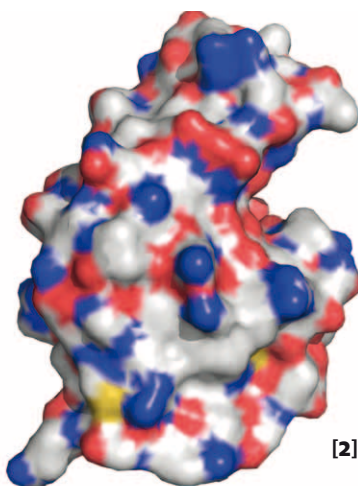
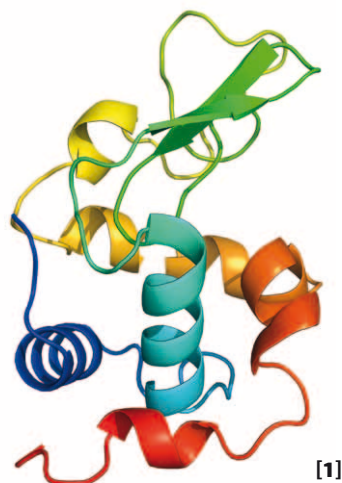
K testování monokrystalů a sběru difrakčních dat je nejvhodnější synchrotron, což je v principu velký urychlovač částic – elektronů nebo

pozitronů. Nabízí laditelnou vlnovou délku a největší intenzitu primárního svazku. Přestože v České republice žádný synchrotron nemáme, lze tato měření provádět na zahraničních přístrojích, které poskytují měřicí čas jednotlivým pracovištím na základě kvality předloženého projektu a jeho cílů. Členové Laboratoře strukturní biologie pravidelně synchrotrony navštěvují, především Bessy II v rámci Helmholtz-Zentrum Berlin, méně často pak Petra III v Hamburku nebo Diamond poblíž Oxfordu. Tato měření však pokrývají pouze několik dnů v roce (obvykle 24 hodin na jednu sérii měření). Nedostupnost blízkého zdroje rentgenového záření ztěžuje okamžitou reakci na právě probíhající experiment. V případě jakéhokoliv náhlého problému lze v některých případech experiment opakovat až při dalším měření, což může být po době trvající několik měsíců.

Počátkem roku 2016 začal plný provoz vědeckého centra BIOCEV ve Vestci u Prahy. Co z toho plyne pro pracovníky FJFI a její studenty? Díky již několik let trvající spolupráci s Biotechnologickým ústavem AV ČR, který je zapojen do projektu BIOCEV, je pro studenty naší fakulty nově dostupná široká škála fyzikálních technik pro strukturní analýzu. Centrum molekulární struktury provozované v rámci projektu BIOCEV na uvedeném ústavu Akademie věd poskytuje mimo jiné přístup k robotickému nasazování krystalizačních experimentů, jejich automatickému vyhodnocení, ale i k novému, vysoce výkonnému laboratornímu zdroji rentgenového záření.

autor: Petr Kolenko

ilustrace: Ing. Jan Stránský, FJFI



**Příklad struktury enzymu vyřešené studenty FJFI**  
[1] Hlavní řetězec enzymu je reprezentován duhově zbarveným modelem.  
[2] Znázornění povrchu enzymu připomínající písmeno C. Na dně výrazného žlábků probíhá enzymatická reakce. Zbarvení povrchu odpovídá druhu povrchového atomu (bílá – uhlík, modrá – dusík, červená – kyslík, žlutá – síra).