
大连化物所揭示裂解多糖单加氧酶与底物相互作用机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9508.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

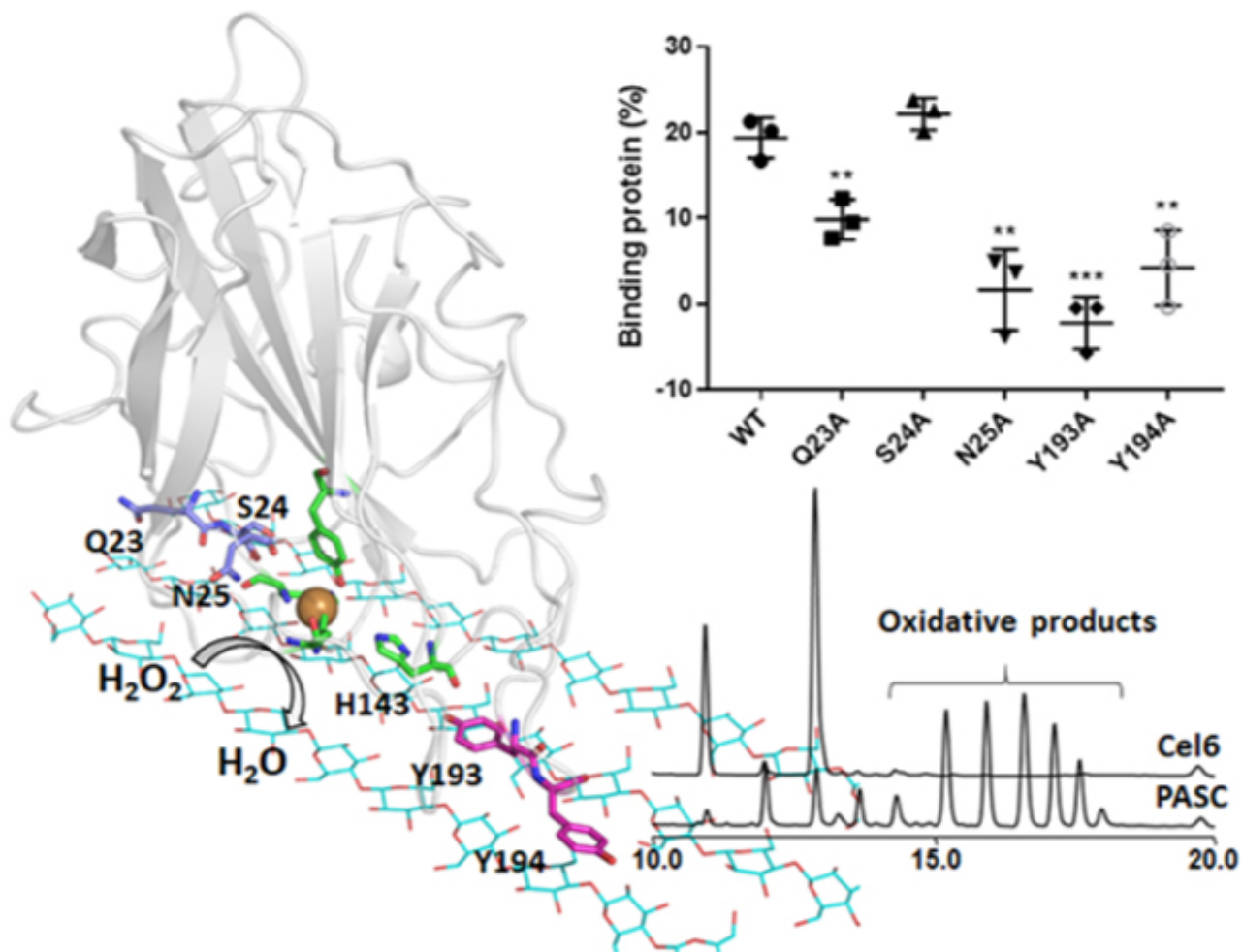
近日，中国科学院大连化学物理研究所天然产物及糖工程研究组研究员尹恒团队与分子反应动力学国家重点实验室分子模拟与设计研究组研究员李国辉团队合作，在裂解多糖单加氧酶（LPMO）与不可溶的纤维素底物相互作用机制方面取得新进展。该研究揭示了LPMO与纤维素底物相互作用的模式，并确定了决定这一过程的关键氨基酸，从而解释了LPMO的底物偏好性和区域选择性。

酶与底物的相互作用是揭示酶的催化机理从而指导酶工程改造的重要基础。然而，由于有些酶的底物不可溶，极大地限制了X射线晶体衍射和核磁共振等传统的酶与底物相互作用研究方法的应用。其中LPMO介导的纤维素氧化裂解就是一个例子。LPMO是近年来发现的一大类可以通过氧化的方式破坏纤维素等不溶多糖结晶区的金属酶，它们可以为纤维素水解酶提供更多的作用位点，从而提高纤维素的降解效率。尹恒团队系统开展了LPMO的发掘及活性研究工作，并合作构建了光电驱动-LPMO酶催化系统（Appl. Catal. B: Environ. , 2020, 265: 558；Int. J. Biol. Macromol. , 2019, 139: 570；Int. J. Biol. Macromol. , 2015, 79: 72）。但目前人们对于LPMO与纤维素底物相互作用机制了解甚少。

针对此问题，研究团队通过计算化学与生物化学相结合的策略，率先揭示了来源于嗜热菌的AA9家族LPMO与纤维素的相互作用模式，发现该酶可以通过同时作用于两条相邻的多糖链，稳定地结合在不可溶的多糖底物的疏水表面，并提出LPMO的区域选择性与其底物结合位置相关。此外，研究团队还建立了此酶促反应过程中过氧化氢的积累与底物结合之间的关系模型，进而证明了LPMO催化不可溶多糖的氧化过程主要是由过氧化氢驱动的。这些发现加深了人们对LPMO与纤维素底物互作机制的认识，为后续酶工程改造及有效利用纤维素等多糖资源提供了理论支持。

相关成果发表在《[物理化学快报](#)》（The Journal of Physical Chemistry Letters

）上。该工作得到国家自然科学基金面上项目、中科院青年创新促进会项目、辽宁省“兴辽英才”项目和大连化物所科研创新基金项目等资助。



LPMO与纤维素的相互作用及关键氨基酸

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发