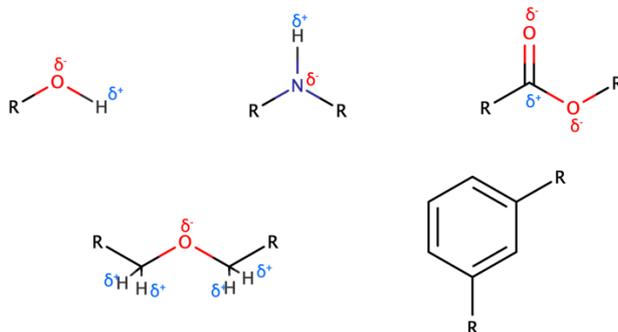


# Svarark

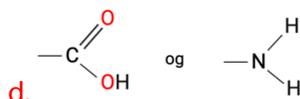
## Bionedbrydning af plastik med enzymer

### Baggrundsteori

- Hvilke atomer kan hydrogen danne hydrogenbindinger med?  
O, N, F
- Find en oversigt over elektronegativiteten af grundstofferne på nettet. Hvad er elektronegativiteten for hydrogen, carbon, nitrogen og oxygen?  
Hydrogen: 2.20  
Carbon: 1.00  
Nitrogen: 3.04  
Oxygen: 3.44
- Identificér det mest elektronegative atom i alle 5 funktionelle grupper  
Alkohol: O  
Amin: N  
Ester: O  
Ether: O  
Aromat: Ingen
- I alle 5 funktionelle grupper indtegn hvilke atomer der er en positiv dipol ( $\delta^+$ ) og hvilket atom der er en negativ dipol ( $\delta^-$ ). Se bort fra R-sidegrupperne.



- I hvilke af de funktionelle grupper vil hydrogenatomerne kunne danne hydrogenbindinger med f.eks. vand?  
Hydroxygruppen og aminen.
- Hvilke af de funktionelle grupper vil kunne tage del i hydrofobe effekter?  
Kun aromaten.
- Hvilke af de funktionelle grupper vil kunne danne dipol-dipol interaktioner (herunder også hydrogenbindinger)?  
Alle på nær aromaten.
- Hvilke af de nedenstående par af funktionelle grupper karakteriserer en aminosyre, hvis det ikke er ladet?  
Hint: Tænk over at de funktionelle både kan være deprotoneret eller protoneret.



- Enzymer får deres tredimensionelle struktur ud fra hvilken type struktur?

## b.Sekundær struktur

10. Den generelle mekanisme for enzymer er:

d. At sænke aktiveringsenergien

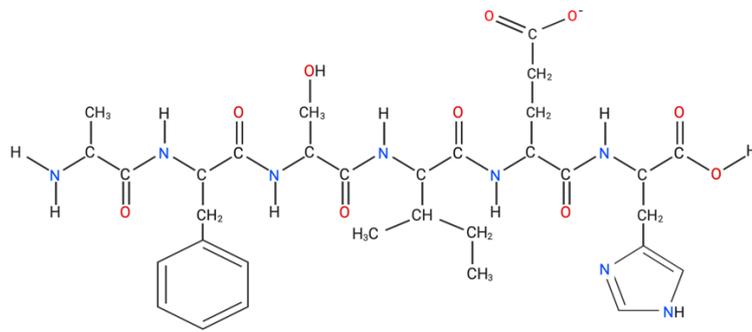
11. Hvilke typer af bindinger kan findes i enzymer?

- Ionbindinger
- Hydrogenbindinger
- Disulfidbindinger
- Peptidbindinger

12. Enzymer hvis katalytiske mekanisme er at flytte funktionelle grupper inde i et molekyle kaldes:

c. Isomeraser

13. Angiv aminosyresekvensen i det viste peptid i tre-bogstavskoden



ala-phe-ser-ile-glu-his

alanin – phenylalanin – serin – isoleucin – glutamat – histidin

14. Hvad vil det sige at enzymer er specifikke?

Ved at sige at enzymer er specifikke mener man at enzymer kun katalyserer én bestemt biokemisk reaktion. Dette er fordi det aktive site i enzymet er bygget af specifikke aminosyrer, så enzymet netop kun binder til det substrat (eller substrater), som det skal indgå i reaktion med.

15. Gøre kort rede for induced-fit modellen. Hvordan opfører enzym og substrat sig?

Enzym og substrat genkender hinanden med høj specificitet, og indgår i et enzym substrat kompleks. Både enzym og substrat ændres strukturelt til at passe bedre til hinanden. Under reaktionen skabes der et transition state intermedat af substratet, inden det omdannes til et eller flere produkter. Produkt(erne) frigives og enzymet kan reagere med et nyt substrat.

## Case

1. Hvorfor er det smart at kløften hvor PETase binder PET primært er hydrofob? Hvilke dele af PET er hydrofobisk?

Plastik er et hydrofobt materiale. De aromatiske ringe af PET er hydrofobiske.

2. Subsite I består af Met, Ile, Trp, Tyr. Hvad har disse fire aminosyrer til fælles?

Met, Ile, Trp, Tyr. De er alle fire hydrofobiske.

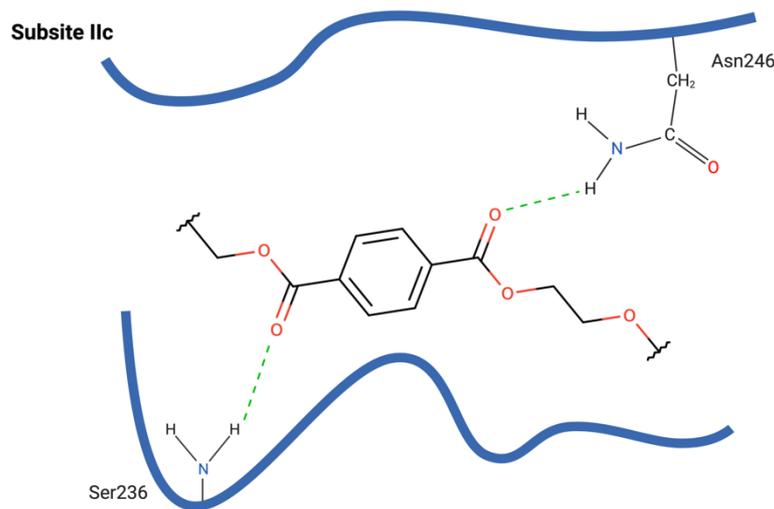
3. Subsite II består af aminosyrerne Thr, Ala, Trp, Ile, Asn, Ser, og Arg. Opdel aminosyrerne efter deres sidekæders egenskaber; upolær, polær, sur eller basisk.

Upolær: Ala, Trp, Ile

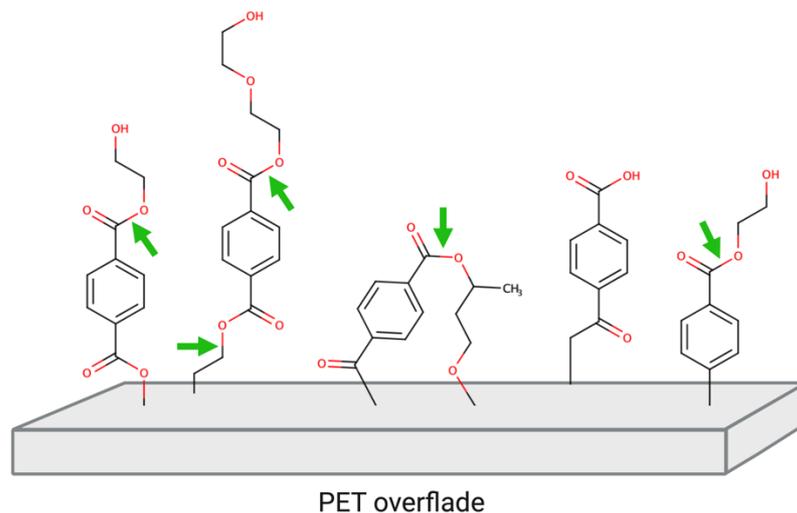
Polær: Thr, Asn, Ser

Basisk: Arg

4. Tegn hydrogenbindingerne som Ser236 og Asn246 danner med MHET i subsite IIc  
Læg mærke til at det er backbone på serinen der danner hydrogenbinding



5. Identificér og sæt en streg alle steder hvor enzymet (PETase) klipper i de forskellige molekyler i overfladen af plastikket.



Udfyld de manglende ord

6. Når en ester hydrolyseres, dannes der en **alkohol** og en **carboxylsyre**.
7. Elektrofiler vil gerne optage en **elektron**. I ester hydrolysen i PETase er det **carbon i carbonylen**, der er elektrofil og **serin**, der er nukleofil.
8. Hvad er de primære ligheder i strukturen af cutin og PET, som indikerer at cutinaser måske ville kunne nedbryde PET?  
**De indeholder begge en esterbinding og begge molekyler er hydrofobiske.**
9. Sammenlign de 3 forskellige enzymer. Hvor mange alpha helixer og beta sheets indeholder de hver især?  
**PETase / 5XJH: 7 alpha, 9 beta**  
**HiCut: 9 alpha, 5 beta**  
**TfCut: 8 alpha, 9 beta**

10. Vi vil nu kigge på disulfidbroerne i proteinerne.

Følg linket og udfør nedenstående trin:

A. *Under Components* → +Add → Selection → Bond property → Disulfide bridges

B. *Representation* → Ball & Stick → + Create Component

Du vil nu kunne se broerne, hvor svovl er markeret i gult.

Hvilke aminosyrer danner disulfidbroer i de 3 enzymer? Numrene viser sig både i sekvensen øverst, og i bunden af 3D billedet. Tag de numre der hedder *auth [ ]*.

PETase / 5XJH: Cys203 - Cys239 og Cys273 - Cys289.

HiCut / 4OYY: Cys17 - Cys94 og Cys156 - Cys163.

TfCut / 4CG1: Cys241 - Cys259.

11. Forskere har fundet ud af en disulfidbro i PETase, gør at det aktive site er mere fleksibelt, så det binder til PET polymeren bedre. Hvilket gør hydrolysen af PET mere effektiv. Hvilken to aminosyrer indgår i broen tættest på det aktive site?

Hint: Det er den længst væk fra C-terminalen.

Cys203 - Cys239