

تأثیر دترژانت غیر یونی بر آنزیم لیپاز باکتری سودوموناس ، مطالعه کینتیکی و دینامیک مولکولی

داریوش مینایی تهرانی*، فاطمه سید مراد

دانشگاه شهید بهشتی ، دانشکده علوم و فناوری زیستی d_mtehrani@sbu.ac.ir

چکیده:

لیپازها در واقع آنزیم های ارزشمندی در صنعت هستند، به ویژه در تولید پودر لباسشویی که در آن نقش مهمی دارند. لیپاز باکتریایی، به ویژه از سودوموناس، به دلیل فعالیت زیاد و پتانسیل اصلاح ژنتیکی، مورد توجه خاص است. تعامل بین لیپاز و مواد شوینده موضوع تحقیق بوده است که منجر به یک مطالعه تحقیقاتی در مورد اثر Triton X-100 بر سودوموناس لیپاز شد. در این تحقیق از هر دو روش سیلیکونی و آزمایشگاهی استفاده شد.

نتایج *in silico* نشان داد که Triton X-100 می تواند به یک منطقه خاص خارج از محل فعال آنزیم متصل شود و منجر به برهمکنش های آگزیز با فنیل آلانین ها در آنزیم شود. در آزمایشگاه (در شرایط آزمایشگاهی)، مشاهده شد که آنزیم بالاترین فعالیت خود را در حضور دترژانت، به ویژه در غلظت مرز بین مونومر و حالت میسلی دترژانت نشان داد. علاوه بر این، وجود دترژانت باعث تغییر در pH و دمای بهینه برای آنزیم شد. تجزیه و تحلیل طیف فلورسانس از یافته های *in silico* پشتیبانی کرد، که نشان دهنده تغییر در طیف انتشار آنزیم در حضور دترژانت است، که نشان دهنده انتقال آمینو اسیدهای آروماتیک به یک محیط آبدوست تر در حضور دترژانت است (Hyochromicity).

به طور کلی، یافته های تحقیق تأیید کرد که لیپاز در حضور دترژانت غیر یونی ترایتون X-100 کاملاً فعال باقی می ماند، در حالی که پتانسیل دترژانت را برای تغییر خواص فیزیکی و شیمیایی آنزیم برجسته می کند. این بینش به درک ما از رفتار لیپاز در حضور مواد دترژانت برای استفاده در صنعت کمک می کند.

کلمات کلیدی: آنزیم، باکتری، دترژانت، فعالیت، دینامیک مولکولی

The effect of a non-ionic detergent on *Pseudomonas* lipase activity, kinetics and molecular dynamics studies

Dariush Minai-Tehrani*, Fatemeh Seyedmorad

Faculty of Life Sciences and Biotechnology, Shahid Beheshti University. d_mtehrani@sbu.ac.ir

Abstract:

Lipases are indeed valuable enzymes in the industry, particularly in the production of washing powder where they play a crucial role. Bacterial lipase, especially from *Pseudomonas*, is of particular interest due to its high activity and potential for genetic modification. The interaction between lipase and detergents has been a subject of inquiry, leading to a research study on the effect of Triton X-100 on *Pseudomonas* lipase. Both *in silico* and *in vitro* methods were employed in this investigation.

The *in silico* results revealed that Triton X-100 can bind to a specific region outside the enzyme's active site, leading to hydrophobic interactions with phenylalanines. In the laboratory (*in vitro*), it was observed that the enzyme exhibited its highest activity in the presence of detergent, particularly at the concentration bordering between the monomer and micelle state of the detergent. Furthermore, the presence of detergent caused a shift in the optimum pH and temperature for the enzyme. The fluorescence spectrum analysis supported the *in silico* findings, demonstrating a change in the emission spectrum indicating the transfer of aromatic amino acids to a more hydrophilic environment in the presence of detergent.

Overall, the research findings confirmed that lipase remains fully active in the presence of non-ionic detergent, while also highlighting the potential for detergents to alter the physico-chemical properties of the enzyme. These insights contribute to our understanding of the behavior of lipase in the presence of detergents, with implications for industrial applications.

Keywords: Enzyme, Bacteria, Detergent, Activity, Molecular dynamics