

## АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ДВУХ ДИОКСИГЕНАЗ - ДЕСТРУКТОРОВ НЕФТИ

Подпорин Д.А., Кондратьев М.С.<sup>1</sup>

Пушкинский государственный естественно-научный институт, Россия, Московская область, г. Пушкино, E-mail: dima.podporin.94@mail.ru

<sup>1</sup>Институт биофизики клетки Российской академии наук, Россия, Московская область, г. Пушкино, E-mail: ma-ko@bk.ru

Улучшение свойств макромолекул, обладающих каталитическими свойствами является одной из ключевых задач биоинженерии. В первую очередь, это касается ферментов, имеющих непосредственное прикладное значение: например, деструкторов нефтепродуктов, катастрофические разливы которых, к сожалению, нередки. Известно, что свойства молекулы белка можно корректировать путем внесения аминокислотных замен, однако поиск мест для такого точечного мутагенеза представляет собой отдельную, не самую простую задачу. Обычно для определения параметров необходимых мутаций используются подходы, основанные на анализе гомологии мезофильных и термофильных белков, или же методы направленной эволюции. Однако, с развитием расчетных методов компьютерного моделирования, в том числе молекулярной динамики (МД), стало возможным оценивать эффективность планируемых замен еще до их осуществления в эксперименте.

Объектом нашего исследования является фермент катехол 1,2-диоксигеназа из двух штаммов бактерий *Acinetobacter radioresistens* (код pdb **2XSR**, 306 аминокислотных остатков) и *Acinetobacter calcoaceticus* (код pdb **1DLM**, 311 аминокислотных остатков). Моделирование этих ферментов важно для наших будущих исследований по улучшению их свойств: на основе концепции повышения стабильности малых глобулярных белков, которая была предложена в Лаборатории структуры и динамики биомолекулярных систем ИБК РАН.

Мы выполнили текстовое и пространственное выравнивание аминокислотных последовательностей пары ферментов и установили среднюю степень их текстовой гомологии (50.81%), тогда как структурно их глобулы очень высоко гомологичны. Методом молекулярного докинга нами была исследована субстратная специфичность двух диоксигеназ, в качестве лигандов рассматривался ряд постепенно усложняющихся ароматических молекул: бензол, нафталин, антрацен, фенантрен, флуорантен. Выявлена зависимость аффинности связывания от молекулярной массы лиганда, для каждой из молекул показано предпочтительное место связывания.