

ДЕСТРУКТОРЫ НЕФТИ: КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ И СУБСТРАТНАЯ СПЕЦИФИЧНОСТЬ

Кондратьев М.С., Бадалов А.А., Хечинашвили Н.Н., Комаров В.М., Самченко А.А., Пунтус И.Ф.

Институт биофизики клетки Российской академии наук - обособленное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный
исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований
Российской академии наук» Адрес: 142290, г.Пушино Московской области,
Институтская, 3, ИБК РАН

До сих пор в глобальной экономике активно используется переработка жидких углеводородов, из-за чего случаются катастрофические разливы нефти и ее производных. Например, в нашей стране при ежегодной добыче нефти в 500 млн. тонн, около 15 млн. тонн попадает в окружающую среду из-за утечек во время транспортировки. Примерно 75% состава нефти составляют углеводороды, среди которых наиболее токсичными являются полициклические ароматические углеводороды. Микроорганизмы играют основную роль в их деградации в природе. В результате ферментативных процессов происходит освобождение углерода из ароматических структур с последующим его включением в биологический круговорот. В аэробных условиях разрушение ароматических углеводородов происходит благодаря диоксигеназам, расщепляющим ароматическое кольцо. Однако, эти ферменты действуют, только если в ароматическом кольце есть две гидроксильные группы в орто- или пара- положении относительно друг друга. Введение одной или двух гидроксильных групп в ароматическое кольцо – один из первых этапов биodeградации ароматических соединений – реализуется благодаря ферментам из класса флавиновых монооксигеназ. Многочисленные генетические исследования показали, что самый распространенный ген этих ферментов в штаммах флуоресцирующих псевдомонад – это ген салицилатгидроксилазы, который и стал объектом нашего исследования. В литературе известно очень мало пространственных структур этих нефтедеструкторов, хотя знание их позволяет не только исследовать полноатомные фермент-субстратные комплексы, но и моделировать процессы каталитических актов, что важно с точки зрения фундаментальной и прикладной науки.

Мы провели сравнение FASTA-последовательности фермента с известной структурой (5EVY) и других секвенированных аналогов на основе гомологии. Затем с помощью метода гибкого докинга получены основные комплексы с типичными субстратами (замещенные производные салицилата), которые ранее были изучены нами экспериментально. Исследуя структуру ферментов, мы выявили точки для замены аминокислот среди периферических аминокислот этих белков, что позволит создать ферменты с повышенной термостабильностью.