

**ДЕСТРУКТОРЫ НЕФТИ: КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ И СУБСТРАТНАЯ СПЕЦИФИЧНОСТЬ**

**М.С. Кондратьев<sup>1</sup>, А.А. Бадалов<sup>1</sup>, Н.Н. Хечинашвили<sup>1</sup>, В.М. Комаров<sup>1</sup>,  
А.А. Самченко<sup>1</sup>, И.Ф. Пунтус<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

<sup>2</sup> Институт биохимии и физиологии микроорганизмов РАН, Пущино, Россия

До настоящего времени глобальная экономика широко использует переработку жидких углеводов, а потому случаи катастрофических разливов нефти и ее производных, к сожалению, нередки. Для примера, в нашей стране, при ежегодной добыче нефти 500 млн. тонн в год, порядка 15 млн. попадает в окружающую среду – в результате утечек при транспортировке. Около 75 % состава нефти приходится на углеводороды, среди которых наиболее токсичными являются полициклические ароматические углеводороды. В природе основную роль в их деградации играют микроорганизмы. В результате ряда ферментативных процессов происходит освобождение из ароматических структур углерода с последующим вовлечением его в биологический круговорот. В аэробных условиях разрушение ароматических углеводородов происходит путем расщепления ароматического кольца диоксигеназами. Однако, эти ферменты действуют лишь в том случае, если у ароматического кольца имеются две гидроксильные группы в орто- или пара – положении по отношению друг к другу. Поэтому введение одной или двух гидроксильных групп в ароматическое кольцо является одним из первых этапов биodeградации ароматических соединений – и это осуществляется благодаря ферментам из класса флавиновых монооксигеназ. Многочисленные генетические исследования показали, что наиболее распространенный ген таких ферментов в штаммах флуоресцирующих псевдомонад является ген салицилатгидроксилазы, которая и стала объектом нашего исследования. В литературе известно крайне мало пространственных структур данных нефтеструктуров, а ведь их знание позволяет не только исследовать полноатомные фермент-субстратные комплексы, но и моделировать процессы каталитических актов, что важно как в фундаментальном, так и в прикладном плане.

Нами было выполнено сравнение FASTA-последовательности фермента с известной структурой (5EVY) и других секвенированных его аналогов, после чего биокатализаторы с неизвестной структурой были реконструированы по гомологии. Далее методом гибкого докинга были получены основные комплексы с типичными субстратами, ранее изученными нами экспериментально (замещенные производные салицилата).

Изучив структуру ферментов, мы выявили места для точечных аминокислотных замен среди периферических аминокислот этих белков – это позволит получить ферменты с улучшенной термостабильностью [1].

1. Khechinashvili NN, Kondratyev MS, Polozov RV. Thermodynamics of globular protein native structure // J Biomol Struct Dyn. 2023 May; 41(8):3218–3221.