A siderophorok és fémek számítógépes vizsgálata
Computational study of siderophore and metal interaction

HATVANI-NAGY Gergő Máté[1,2,*], MINOFAR Babak[2], VISKOLCZ Béla[1,2], FISER Béla[1,2,3,**]

[1] Institute of Chemistry, University of Miskolc, 3515 Miskolc, Hungary

[2] Higher Education and Industrial Cooperation Centre, University of Miskolc, 3515 Miskolc, Hungary

[3] Ferenc Rakoczi II Transcarpathian Hungarian University, 90200 Beregszász, Transcarpathia, Ukraine

[*] gergo.mate.hatvani-nagy@uni-miskolc.hu; **bela.fiser@uni-miskolc.hu

ABSTRACT

Siderophores are specialized macromolecules produced by microorganisms and plants to counteract potential iron shortages in the environment. They have a strong chelating ability and due to this, they are not only scavenge iron but also other metals, such as Ni^{2+}, Cu^{2+}, Cd^{2+}, Pb^{2+}, $Zn^{2+,}$ In^{3+}, V^{3+}, Ga^{3+}, Co^{3+}, Al^{3+}, Mn^{3+}, Th^{4+}, U^{4+}, and Pu^{4+}. There are four major types of siderophores according to their functional groups. The four major groups are hydroxamate, catecholate, phenolate, and carboxylate. Furthermore, there is a mixed type of group as well. In order to explore the industrial and other applications of siderophores, it is essential to compare siderophores of different types. Molecular dynamics (MD) simulation provide an excellent basis for this. Thus, by using MD simulations, five metals were examined for each major type of siderophore. Among the metals, trivalent and divalent iron, cobalt (Co^{3+}), copper (Cu^{2+}), and zinc (Zn^{2+}) were studied in combination with the siderophores, staphyloferrin A (carboxylate), desferrioxamine E (hydroxamate), enterobactin (catecholate), piochelin (phenolate), and pyoverdine (mixed).

Keywords: Siderophores, molecular dynamics, GROMACS, metal ions, macromolecules

KIVONAT

A szideroforok olyan speciális makromolekulák, amelyeket elsősorban mikroorganizmusok és növények termelnek, hogy a környezetben esetlegesen fellépő vashiányt ellensúlyozzák. Erős kelátképző képességüknek köszönhetően nemcsak a vasat, hanem más fémeket is megkötnek, például Ni^{2+}-, Cu^{2+}-, Cd^{2+}-, Pb^{2+}-, Zn^{2+}-, In^{3+}-, V^{3+}-, Ga^{3+}-, Co^{3+}-, Al^{3+}-, Mn^{3+}-, Th^{4+}-, U^{4+}- és Pu^{4+}-ionokat. Funkcionális csoportjaik alapján a szideroforok négy fő típusba sorolhatók: hidroxamát-, katekolát-, fenolát- és karboxilát-típusúak. Emellett létezik egy vegyes típusú csoport is. A szideroforok ipari és egyéb hasznosítása érdeképen a különböző típusú szideroforok összehasonlítása elengedhetetlen. Ehhez a molekuladinamikai szimulációs módszerek egy kiváló alapot nyújtanak. Ebből kifolyólag mindegyik fő szideofór típus esetében öt fémet vizsgáltunk. A fémek közül a három- és kétértékű vasat, a kobaltot (Co^{3+}), a rezet (Cu^{2+}) és a cinket (Zn^{2+}), a szideroforok közül pedig a staphyloferrin A (karboxilát), a desferrioxamin E (hidroxamát), az enterobaktin (katekolát), a piochelin (fenolát) és a pyoverdine (kevert) szideroforok voltak elemezve és összehasonlítva.

Kulcsszavak: szideroforok, molekuladinamika, GROMACS, fémionok, makromolekula