

Enzymy s dvěma “spřaženými” měďnatými ionty v aktivním místě (coupled binuclear copper enzymes, CBC) jsou důležitou skupinou redoxně aktivních metaloenzymů. Katalyzují různé chemické přeměny, typicky oxidační reakce. Pomocí hybridních kvantových a molekulově mechanických výpočtů (QM/MM) jsme výpočetně charakterizovali počáteční kroky v reakčním mechanismu dvou CBC enzymů: katecholoxidáz a *o*-aminofenoloxidáz. Katecholoxidázy byly reprezentovány polyfenoloxidázou 6 (PPO6) a katecholoxidázou z *Ipomoea batatas* (IBCO), *o*-aminofenoloxidázy pak zastupoval protein NspF, pojmenovaný podle svého genového kódu. Porovnáním vypočtených údajů s předchozími pracemi zabývajícími se tyrosinázou (Ty) jsme se pokusili odpovědět na otázku, proč NspF a Ty hydroxylyjí fenoly, zatímco katecholoxidázy nikoli. Naše předběžné výsledky ukazují, že existuje významný rozdíl v energii tranzitního stavu určujícího rychlost reakce, který odpovídá radikálové reakci aktivovaného kyslíkového (oxylového) radikálu spolu s vazbou fenolu na jeden z iontů mědi v aktivním místě. Vypočtená energie tohoto (v pořadí druhého) tranzitního stavu je nižší pro NspF než pro PPO6 a IBCO. Naše práce tak může pomoci pochopit chemoselektivitu CBC enzymů, identifikovat aminokyselinové zbytky ze vzdálenější druhé koordinační sféry, které jsou zodpovědné za rozdílné reaktivity enzymů CBC, a potenciálně pak otevřít nové cesty k návrhu modifikací v těchto enzimech nebo jejich biomimetických systémech.