
研究实现苯乙烯单加氧酶催化萜烯类化合物高立体选择性环氧化

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/35283.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究实现苯乙烯单加氧酶催化萜烯类化合物高立体选择性环氧化

。手性环氧化合物是合成医药、香料和功能材料的重要中间体。柠檬烯作为萜烯化合物，其手性环氧产物在手性试剂和生物基聚合物制备方面具有应用价值。然而，现有的生物催化方法存在底物负载量低、产物收率不高、立体选择性差等问题，制约了其工业应用。

中国科学院成都生物研究所联合河南农业大学、巴基斯坦伊斯兰堡COMSATS大学等，将苯乙烯单加氧酶应用于脂肪族萜烯的环氧化反应，实现了柠檬烯的高立体选择性环氧化，为可再生原料制备高价值手性环氧化物提供了新策略。

该研究筛选了18种不同来源的苯乙烯单加氧酶，发现来自Streptomyces gardneri

的SgStyA表现出独特的反式选择性和较高的催化效率。AlphaFold结构预测和分子对接分析确定了控制立体选择性的三个关键残基位点即F50、F194和V209。

进一步，该研究通过系统的定点突变与组合突变揭示了“位阻调控”立体选择性的机制：第50位和第209位残基的大小共同决定产物的立体构型。基于这一机制，研究构建了三个关键突变体——SgStyA-M1具备顺式选择性，SgStyA-M2为顺式选择性，SgStyA-M3表现出反式选择性。这些突变体对(R)-(+)-柠檬烯表现出优异的立体选择性，并对(S)-(-)-柠檬烯显示出互补的立体选择性，进而实现了四种手性纯柠檬烯-1,2-环氧化物的高效制备。

为阐明立体选择性调控的分子机制，该研究开展了分子动力学模拟。结果显示，第50位残基的大小影响底物的接近程度，第194和第209位残基通过空间位阻协同调控底物的结合取向。在SgStyA-M1中，较小的Leu50允许底物更接近，配合较大的Phe194和Ile209引导底物形成利于顺式环氧化的构象；在SgStyA-M3中，体积较大的Trp50阻止底物过度接近，较小的Met194和Val209为底物提供足够空间，形成利于反式环氧化的构象。同时，在放大制备实验中，以SgStyA-M2和SgStyA-M3全细胞催化4 mM (R)-柠檬烯，产物的收率分别达到83.1%和83.6%。

上述研究将苯乙烯单加氧酶的底物范围拓展至脂肪族萜烯类化合物，丰富了生物催化立体选择性环氧化的酶工具箱，也为基于可再生资源绿色合成高附加值手性化合物提供了可持续的新途径。

相关研究成果发表在《美国化学会-催化》(ACS

Catalysis) 上。研究工作得到国家自然科学基金和中国科学院相关项目等的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：成都生物研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](#)转发