

# Bioinformatische Identifikation neuer Halogenasen



Diplomand	Nicolas Imstepf
Korrektorinnen ZHAW	Prof. Dr. Rebecca Buller, Dr. Christin Peters

Die regio- und stereoselektive Halogenierung von niedermolekularen Verbindungen ist von grossem Wert für die pharmazeutische und agrochemische Industrie. Die Derivatisierung von nicht aktivierten C-H-Bindungen ist jedoch häufig eine Herausforderung für existierende organisch-chemische Methoden, besonders in der industriellen Produktion. In diesem Zusammenhang gewinnen daher Biokatalysatoren an Bedeutung, da sie im Vergleich zu konventionellen Katalysatoren häufig selektiver und ökologischer sind. Die Identifikation von neuen Halogenasen, Biokatalysatoren, welche die regio- und stereoselektive Halogenierung von niedermolekularen Verbindungen ermöglichen, ist daher sowohl von akademischem als auch industriellem Interesse.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ausgehend von halogenierten Metaboliten *in silico* nach potenziellen Halogenasen gesucht. Spezielle Beachtung wurde dabei Substraten geschenkt, welche nicht in das Substratspektrum bekannter Halogenasen fallen. Mit der Analyse von massenspektrometrischen Metabolom-Daten konnten zwar halogenierte Verbindungen in Mikroorganismen identifiziert, diese Metabolite aber nicht mit potenziellen Halogenasen verknüpft werden. Deshalb wurde ein alternativer Ansatz aus der Kombination einer halbautomatischen Literaturrecherche und einer Genom-Analyse entwickelt (Abb. 1). Die Methode wurde mit bekannten

Halogenasen validiert. Mit Hilfe dieser Identifikations-Strategie konnten bisher unbekannte, potenzielle Halogenasen möglichen Substraten zugeordnet werden.

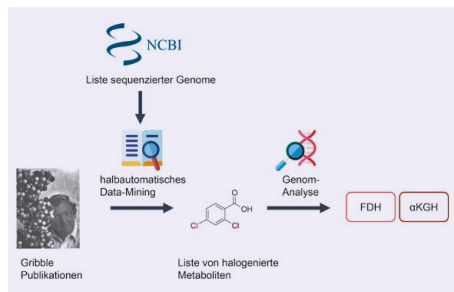


Abb. 1: Workflow zur Identifikation von Halogenasen durch die Kombination einer halbautomatischen Literatursuche nach halogenierten Metaboliten und der Genomanalyse der implizierten Organismen.

Bildquellen:

Flaticon, *the largest database of free vector icons*. Flaticon. <https://www.flaticon.com> (2020)

Dartmouth College. <https://home.dartmouth.edu> (2020).

Sayers, E. W. *et al.* Database resources of the National Center for Biotechnology Information. *Nucleic Acids Res.* **47**, D23–D28 (2019).