

## Изучение конформационных и динамических свойств магаинина 2 и его усеченных аналогов методом молекулярной динамики

**Щука Татьяна Витальевна, Терешкина Ксения Борисовна**

*аспирант, ассистент*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: tatsina@moldyn.org*

Магаинины – группа коротких катионных пептидов, выделенных из кожи Африканской шпорцевой лягушки *Xenopus laevis* [1]. Они демонстрируют как антибактериальную, так и противораковую активность, но не проявляют гемолитических свойств. В липидных мембранах магаинины образуют  $\alpha$ -спирали [2].

Антимикробный пептид магаинин 2 – первый из открытых у Vertebrata антимикробных пептидов – включает 23 аминокислотных остатка. В ЯМР-экспериментах установлено, что магаинин 2 имеет  $\alpha$ -спиральную структуру в додецилфосфохолиновых мицеллах, мицеллах додецилсульфата натрия, в водном растворе трифторэтанола [3].

В экспериментах *in vitro* показано, что магаинин 2 обладает большей антимикробной активностью по сравнению со своими структурными аналогами, в разной степени усеченными с N-конца [4].

В работе для изучения конформационных и динамических свойств магаинина 2 и нескольких усеченных аналогов пептида используются методы молекулярной динамики [5, 6]. Представлены результаты изучения МД магаинина и его аналогов в столкновительной среде при температурах от 300 К до 1000 К. Обсуждаются особенности динамической структуры  $\alpha$ -спиралей, а также значение подвижности различных аминокислотных остатков полипептидной цепи для биологической активности пептидов. Посредством МД эксперимента подтверждены данные о структурных требованиях для проявления антимикробной активности магаининовых пептидов.

### Литература

1. Zasloff M (1987) Proc Natl Acad Sci USA 84:5449
2. Gesell J, Zasloff M, Opella SJ (1997) J Biomol NMR 9:127-135
3. Wang Z., Wang G. (2004) APD: An antimicrobial peptide database // Nucleic Acids Res. 32, D590-D592.
4. Zasloff M, Martin B, Chen Hao-Chia (1988) Proc Natl Acad Sci USA 85:910-913
5. Шайтан К.В., Терешкина К.Б. Молекулярная динамика белков и пептидов. Методическое пособие. М.:Ойкос, 2004.-103с.
6. Shaitan K.V., Tereshkina K.B. (2005) Molecular Dynamics of Small Peptides Using Ergodic Trajectories In: BIOINFORMATICS OF GENOME REGULATION AND STRUCTURE II (N. Kolchanov and R.Hofstaedt, eds.), Springer Science+Business Media, Inc., pp. 271-284.