

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АНТИМИКРОБНЫХ ПЕПТИДОВ С МОДЕЛЬНЫМИ МЕМБРАНАМИ¹

Ермакова Е.А., Зуев Ю.Ф.
КИББ КазНЦ РАН

420111, г. Казань, Р.В. 30, e-mail: ermakova@kibb.knc.ru

Антимикробные пептиды (АМП) являются важным компонентом иммунной системы и вызывают значительный интерес как новый потенциальный класс природных антибиотиков и иммунорегуляторных соединений. В то же время, механизм действия АМП остается неизвестным.

В данной работе взаимодействие представителя катионных антимикробных пептидов - дефензина сосны с модельными мембранами исследовано методом молекулярной динамики (coarse-grained MD). Для моделирования были использованы два типа мембран: мембрана, состоящая из одного типа липидов - фосфатидилхолина (POPC), и комбинированная мембрана, содержащая фосфатидилхолин и фосфатидилглицерол в молярном соотношении 3:1 (POPC:POPG).

Показано, что дефензин образует устойчивый комплекс с комбинированной мембраной и не взаимодействует с мембраной из POPC, рассчитаны энергии межмолекулярного взаимодействия, определены аминокислотные остатки дефензина, играющие ключевую роль во взаимодействии с мембранами. Анализ молекулярно-динамической траектории продолжительностью 6 микросекунд показал, что при температуре 303K° дефензин не образует пор в комбинированной мембране (POPC:POPG) и не встраивается в мембрану.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Татарстан, грант № 15-44-02309а