

## **Анализ взаимодействий трансмембранных пептидов с липидным окружением методом молекулярной динамики**

**Смирнов К.В.**

*НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия*

### **Аннотация**

Мембранные белки составляют около четверти всех белков в клетке и являются наиболее приоритетными мишенями для существующих и разрабатываемых терапевтических методик, благодаря своим способностям передавать сигналы и молекулы сквозь мембрану. Несмотря на то, что на данный момент уже описаны многие механизмы функционирования мембранных белков, роль липидного окружения до сих пор не определена до конца. Нейраминидаза-1 – фермент, отщепляющий остатки сиаловой кислоты от гликопротеинов и гликолипидов, находящихся на поверхности клеточной мембраны. Дисфункция нейраминидазы-1 связана с тяжелыми нейродегенеративными заболеваниями, для которых на данный момент не существует эффективных методов лечения.

В настоящей работе было проведено исследование трансмембранного домена нейраминидазы-1 человека в липидном окружении методами молекулярной динамики (МД). В ходе работы были рассчитаны три траектории МД длиной 500 наносекунд систем, состоящих из указанного пептида в  $\alpha$ -спирально конформации, встроенного в гидратированный липидный бислой, с различными стартовыми условиями. Для каждой из полученных траекторий был рассчитан ряд структурно-динамических характеристик, описано поведение трансмембранного  $\alpha$ -спирального фрагмента и проведен анализ пептид-липидных взаимодействий.