



OBAVIJEST

Javna obrana teme doktorskog rada studenta
poslijediplomskog sveučilišnog studija BIOFIZIKA

MATKA MALEŠA, mag. educ. math. et phys.

pod naslovom

**“Različiti aspekti mehanizma djelovanja antimikrobnih peptida
kroz simulacijske studije”**

održat će se u petak, **11. ožujka 2022., u 11.00 sati** na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Splitu (dvorana B3-53) pred članovima Stručnog povjerenstva:

1. doc. dr. sc. Željka Sanader Maršić, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - predsjednica,
2. izv. prof. dr. sc. Željana Bonačić Lošić, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - članica,
3. izv. prof. dr. sc. Marija Raguž, Medicinski fakultet Sveučilišta u Splitu - članica.

Mentorica: izv. prof. dr. sc. Larisa Zoranić, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu.

Pozivaju se svi zainteresirani da prisustvuju javnoj obrani.



Naslov:

Različiti aspekti mehanizma djelovanja antimikrobnih peptida kroz simulacijske studije

Sažetak:

Antimikrobni peptidi (AMP) su obećavajuća alternativa klasičnim antibioticima jer imaju široko antimikrobno djelovanje, a patogeni na njih teže razvijaju otpornost. Osim prirodnih, sintetiziraju se novi AMP s ciljem jačeg antimikrobnog djelovanja i smanjenja toksičnosti na ljudske stanice. U ovom radu simulacijama metodom molekularne dinamike istražit će se mehanizam djelovanja i karakteristična svojstva AMP-a: anisaxina, kiadina i adepantina, u interakcijama s modelima eukariotskih i bakterijskih membranama. Analizirat će se kako broj i položaj aminokiseline Gly mijenja svojstva peptida i interakciju s membranom. Istražit će se djelovanje peptida s Gram-negativnom i Gram-pozitivnom membranom. Ispitat će se međukorak u mehanizmu djelovanja koji uključuje sferična ispupčenja gornjeg dijela lipidnog dvosloja, opažen pri velikim koncentracijama peptida na površini membrane, te je li takva deformacija može uzrokovati ekstrakciju lipida. Cilj je bolje razumijevanje mehanizma djelovanja i otkrivanje potencijalnog antibiotskog djelovanja.

Title:

Different aspects of the mechanism of actions of antimicrobial peptides throughout simulation studies

Abstract:

Antimicrobial peptides (AMPs) are a promising alternative to conventional antibiotics due to their broad spectrum of antimicrobial activity, to which pathogens have difficulty developing resistance. In addition to natural ones, new AMPs are being synthesized to achieve more potent antimicrobial activity and reduce toxicity to human cells. In this thesis, using molecular dynamics simulations, we will investigate the interaction of the following AMPs: anisaxin, kiadin and adepantin with eukaryotic and bacterial membrane models to determine their characteristic properties and mechanism of actions. We will analyze the influence of the number and positions of amino acid Gly in the primary sequence on the peptide activity. Also, we will explore differences in the interaction of AMPs with Gram-negative and Gram-positive membranes. We will test if spherical bulges of the upper bilayer leaflet, observed at high peptide concentrations on the membrane surface, are part of the mode of action of AMPs, and whether such deformation can cause lipid extraction. The main goal is to improve our current knowledge on the mechanism of action and identify peptides with the potential for antibiotic use.