

## A molekuláris felismerés új aspektusai glikopeptid antibiotikumokban

Batta Gyula

DE-OEC Gyógyszerésztudományi Kar Gyógyszerészi Kémia Tanszék és  
MTA Antibiotikum-kémiai Kutatócsoport  
4010 Debrecen Egyetem tér 1 (batta@tigris.unideb.hu)

A glikopeptid (vankomicin típusú) antibiotikumokat mostanáig utolsó védvonalként tartották számon a meticillin rezisztens *Staphylococcus aureus* (MRSA) ellen. Sajnos a Gram-pozitív baktériumok növekvő vankomicin rezisztenciája világméretű járvánnyal fenyegethet. A glikopeptid antibiotikumok hatásmechanizmusa azon alapul, hogy a sejtfalat építő peptidoglikán D-Ala-D-Ala vége erősen kötődik az antibiotikum karboxilát-aniont kötő helyéhez. A kötődést sok esetben kooperatívan erősíti az antibiotikumok dimerizációja vizes közegben, és a dimerek antiparallel  $\beta$ -redős másodlagos szerkezetet mutatnak<sup>1</sup>. A kristályos vankomicin - NAc-D-Ala komplexben antiparallel és paralel elrendeződést is találtak hosszú oligomerekben.

Az irodalmi részben összehasonlítjuk a különböző szerkezetvizsgáló módszerekkel nyert eddigi eredményeket. A jelen mágneses magrezonancia (NMR) vizsgálatainkban arra keresünk választ, hogy az eremomicin oligomerizációs állapota vizes közegben függ-e a ligandum minőségétől. Molekula dinamikai számítások<sup>2</sup> azt sejtetik, hogy a sejtfal-antibiotikum komplexek kötési energiája az antibiotikum belső mozgásaitól is függhet. <sup>15</sup>N-NMR relaxációs vizsgálataink<sup>3</sup> ezt a feltevést kísérletileg bizonyíthatják.

### Hivatkozások:

1. P. J. Loll, R. Miller, C. M. Weeks, P. H. Axelsen, *Chemistry and Biology*, 1998, **5**, 293
2. S. Jusuf, P.J. Loll, P.H. Axelsen, *J. Am. Chem. Soc.* 2002, **124**,
3. Gy. Batta, F. Sztaricskai, M. O. Makarova, E.G. Gladkikh, V.V. Pogozeva, T. F. Berdnikova, *Chemical Communications*, 2001, 501

