

## Conformational Studies of G1 Peptide by NMR Methods

임성혁, 김대성, 신동혁,<sup>1</sup> 성영철,<sup>2</sup> 원호식

한양대학교 이과대학, 동화약품 중앙연구소,<sup>1</sup> 포항공과대학<sup>2</sup>

HIV-1의 gp120와 T-Cell의 CD4와의 binding을 억제함으로 HIV-1의 감염을 억제하는 펩티드를 스크린 하였고, 항 AIDS 효과가 우수한 펩티드가 도출되었고 그 중 하나인 12개의 아미노산으로 구성되어 있는 G1 peptide를 사용하였다. 본 연구에서는 Correlation spectroscopy(COSY), Total correlated spectroscopy (TOCSY), Nuclear overhauser effect spectroscopy (NOESY)등의 2D NMR 기법을 이용하여 G1 peptide의 <sup>1</sup>H-NMR 신호지정을 완료하였고, 10, 50, 100, 300, 500ms의 mixing time으로 얻어진 NOE 신호의 세기로 NOE build-up curve를 구하여 정확한 수소들 간의 거리정보를 얻었으며, 이 거리정보를 바탕으로 Distance Geometry(DG)와 Molecular Dynamics(MD)를 수행하여 펩티드의 구조연구를 시행하였다. 얻어진 10개의 구조는 residue 5 ~ residue 10 부분이 원형에 가까운 구조를 가지며, residue 6 ~ residue 9 부분에서 backbone skeleton의 RMSD값이 0.86Å이고, 이 부분의 전체원자에 대한 RMSD값이 2.26Å인 구조가 얻어졌다. 얻어진 구조는 gp120와 CD4와의 binding을 억제할 수 있는 특이한 구조를 나타내고 있다.