

## СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ ЛАКТОФЕРРОКСИНОВ Агаева Л.Н., Абдинова А.А., Ахмедова С.Р., Ахмедов Н.Ф., Ахмедов Н.А.

Бакинский государственный университет  
ул. Захида Халилова 23, г. Баку, Азербайджан  
Азербайджанский государственный педагогический университет  
ул. Узеира Гаджибекова 34, г. Баку, Азербайджан  
Азербайджанский технический университет  
ул. 3. Халилова 23, г. Баку, AZ-1148, Азербайджан; e-mail: leylanamig@mail.ru  
Поступила в редакцию 23.06.2023. DOI: 10.29039/rusjbpс.2023.0585

**Аннотация.** Методом теоретического конформационного анализа исследованы конформационные возможности молекулы лактоферроксина А (Н-Tyr1-Leu2-Gly3-Ser4-Gly5-Tyr6-OH) и лактоферроксина В (Н-Arg1-Tyr2-Tyr3-Gly4-Tyr5-OH). Потенциальная энергия системы выбрана в виде суммы невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Найдены низкоэнергетические конформации молекул, значения двугранных углов основных и боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в состав молекулы, оценена энергия внутри- и межостаточных взаимодействий. Показано, что пространственная структура молекулы лактоферроксина А представляется четырнадцатью формами основной цепи, а пространственная структура молекулы лактоферроксина В одинадцатью формами основной цепи. Сравнение полученных низкоэнергетических конформаций лактоферроксинов А и В показывает, что у них достаточно много общего. В маленький энергетический интервал 0-3,0 ккал/моль у этих молекул попадают много конформаций. Поэтому можно именно этим объяснить то, что обе молекулы выполняют общую биологическую функцию. Можно предположить, что в выполнении биологической функции участвуют триазинные аминокислотные остатки. В похожих конформациях их боковые цепи в пространстве находятся приблизительно в одинаковых положениях. Полученные результаты могут быть использованы для выяснения структурной и структурно-функциональной организации молекул лактоферроксинов.

**Ключевые слова:** экзорфин, лактоферроксин, опиоид, структура, конформация.

Опиоидные пептиды в настоящее время считаются наиболее изученной группой сигнальных веществ пептидной природы. Опиум вызывает обезболивание, успокоение и засыпание, также эйфорическое состояние и ряд вегетативных реакций. Эти пептиды бывают животного и растительного происхождения. Ряд экзогенных пептидов, получаемых с пищей, обладают опиоподобными свойствами. Такие пептиды были названы экзорфинами. Открытие опиоидной активности пептидных компонентов пищи послужило основанием предположить, что некоторые виды пищи могут воздействовать на центральную нервную систему подобно опиатным препаратам. Обнаружен ряд молочных экзорфинов, имеющих свойства антагонистов опиоидных рецепторов. К ним относятся казоксин А, В, С, человеческий казоксин D, а также лактоферроксины А, В и С. Возможность образования этих пептидов при гидролизе соответствующих белков пептидазами желудочно-кишечного тракта доказана *in vitro*. Представителями экзорфинов являются также цитохрофины и геморфины. Предполагается, что эти пептиды могут образовываться *in vivo* при протеолитическом расщеплении цитохрома b и гемоглобина. Проведено исследование нейротропных эффектов опиоидных пептидов фрагментов глутена, рубиско и цитохрома b. Показано, что обладающие относительной  $\delta$ -селективностью экзорфин С и рубисколин-5 характеризуются сходным по направленности действием на поведение детенышей белых крыс. Слабо влияя на состояние экспериментальных животных, при острых инъекциях, после хронического введения в 1 и 14-й дни жизни они вызывали снижение тревожности и улучшение обучения в лабиринте с пищевым подкреплением. Последствия применения цитохрофина-4 были наиболее близки к действию  $\beta$ -казоморфина-5 короткого  $\mu$ -селективного фрагмента  $\beta$ -казеина. Оба эти пептида оказывали анксиолитическое влияние при острых инъекциях; после хронического введения их эффекты быстро угасали по мере созревания мозга детенышей [1-3].

Нами были исследованы структурно-функциональные организации опиоидных пептидов энкефалинов, эндорфинов, эндоморфинов, динорфинов, неэндорфинов, адренорфина, а в настоящее время исследуется пространственная структура экзорфинов. Эта работа является продолжением наших предыдущих исследований [4-12].

Расчет молекулы выполнен с помощью метода теоретического конформационного анализа. Потенциальная функция системы выбрана в виде суммы невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Невалентные взаимодействия были оценены по потенциалу Леннарда-Джонса. Электростатические взаимодействия рассчитывались в монопольном приближении по закону Кулона с использованием парциальных зарядов на атомах. Конформационные возможности молекулы рубисколина изучены в условиях водного окружения, в связи, с чем величина диэлектрической проницаемости принята равной 10. Энергия водородных связей оценивалась с помощью потенциала Морзе. В наших вышеупомянутых работах подробно описаны используемые потенциальные функции [4-6].

При изложении результатов расчета использована классификация пептидных структур по конформациям, формам основной цепи и шейпам пептидного скелета. Конформационные состояния полностью определяются значениями двугранных углов основной и боковых цепей всех аминокислотных остатков, входящих в данную молекулу. Формы основной цепи фрагмента образуются сочетаниями форм R, B, L остатков в данной последовательности. Формы основной цепи дипептида могут быть разделены на два класса – свернутые (f) и развернутые (e) формы, которые названы шейпами. Все конформации группируются по формам основной цепи, а формы – по шейпам. Для обозначения конформационных состояний остатков использованы идентификаторы типа  $X_{ij}$ , где X определяет низкоэнергетические области конформационной карты  $\varphi - \psi : R(\varphi, \psi = -180^\circ - 0^\circ)$ ,  $B(\varphi = -180^\circ - 0^\circ, \psi = 0^\circ - 180^\circ)$ ,  $L(\varphi, \psi = 0^\circ - 180^\circ)$ , и  $P(\varphi = 0^\circ - 180^\circ, \psi = -180^\circ - 0^\circ)$ ;  $ij \dots = 11 \dots, 12 \dots, 13 \dots, 21 \dots$  определяет положение боковой цепи ( $\chi_1, \chi_2 \dots$ ), причем индекс 1 соответствует значению угла в пределах от 0 до  $120^\circ$ , 2 – от  $120^\circ$  до  $-120^\circ$ , и 3 – от  $-120^\circ$  до  $0^\circ$ . Обозначения и отсчеты углов вращения соответствуют номенклатуре IUPAC-IUB [13].

Трехмерная структура молекулы лактоферроксина А (Н-Тур1-Leu2-Gly3-Ser4-Gly5-Тур6-ОН) была исследована фрагментарно. Сначала, на основе низкоэнергетических конформаций соответствующих аминокислотных остатков изучена пространственная структура N-концевого тетрапептидного фрагмента Н-Тур1-Leu2-Gly3-Ser4 молекулы лактоферроксина А и определены его стабильные конформации. На втором этапе, на основе низкоэнергетических конформаций N-концевого тетрапептидного фрагмента Н-Тур1-Leu2-Gly3-Ser4 и метиламида N-ацетил-глицина и метиламида N-ацетил L-тирозина была рассчитана пространственная структура молекулы лактоферроксина А (Н-Тур1-Leu2-Gly3-Ser4-Gly5-Тур6-ОН).

Для исследования пространственной структуры молекулы лактоферроксина А начальные приближения формировались на основе конформаций шестнадцати форм основной цепи N-концевого тетрапептидного фрагмента Н-Тур1-Leu2-Gly3-Ser4, четырех форм основной цепи Gly5 и трех форм основной цепи Тур6. Поэтому на первом этапе были рассчитаны несколько сот конформаций гептапептидной молекулы лактоферроксина А. Результаты расчета показали, что возникает энергетическая дифференциация между конформациями, формами основных цепей и шейпами. В энергетический интервал (0-6,0) ккал/моль попадают конформации четырнадцати шейпов пептидного скелета. Эти шейпы представлены четырнадцатью формами основной цепи. Из каждого шейпа выбрана самая стабильная конформация, которые представлены в таблице 1. Здесь указаны энергетические вклады невалентных ( $U_{нев.}$ ), электростатических ( $U_{эл.}$ ), торсионных ( $U_{торс.}$ ) взаимодействий и относительная ( $U_{отн.}$ ) энергия оптимальных конформаций молекулы лактоферроксина А. Геометрические параметры четырех конформаций, относительная энергия которых меньше 2,0 ккал/моль представлены в таблице 1. Энергия невалентных взаимодействий в низкоэнергетических конформациях изменяется в энергетическом интервале (-23,8)–(-16,1) ккал/моль, электростатических взаимодействий (4,5)–(6,8) ккал/моль, торсионных взаимодействий (2,3)–(4,1) ккал/моль (табл. 1).

Глобальной конформацией молекулы лактоферроксина А является конформация  $R_2R_{32}RR_{32}RR_3$  шейпа ffff. Конформация является выгодной по невалентным взаимодействиям, вклад которых наибольший (табл. 1). В этой конформации возникают водородные связи между атомом N-H Тур1 и C=O атомом боковой цепи Ser4, между атомом C=O основной цепи Leu2 и атомом N-H основной цепи Gly5 и между атомом C=O основной цепи Leu2 и атомом N-H основной цепи Тур6. Здесь образуется спиральная структура, при этом возникают эффективные взаимодействия между атомами основными и боковыми цепями аминокислотных остатков (рис. 1а). Тур1 эффективно взаимодействует с аминокислотными остатками Leu2, Ser4 и Gly5. Leu2 эффективно взаимодействует с аминокислотными остатками Ser4, Gly5, Тур6.

Вторая низкоэнергетическая конформация молекулы лактоферроксина А является конформация  $B_2B_{21}BB_{32}RR_1$  шейпа eeeef с относительной энергией 0,9 ккал/моль. В этой структуре первые четыре аминокислотные остатки образуют развернутую основную цепь, последние два аминокислотные остатка свернутую форму основной цепи. В этой конформации возникает водородная связь между атомом основной цепи C=O Leu2 и атомом N-H основной цепи Ser4. Конформация  $B_2B_{21}BB_{32}BB_3$  шейпа eeeee от предыдущего отличается формой основной цепи C-концевого дипептидного участка. Поэтому межостаточные взаимодействия в N-концевом тетрапептидном участке одинаковые. В обеих конформациях Тур1 эффективно взаимодействует с трипептидным участком Leu2-Gly3-Ser4. Leu2 эффективно взаимодействует дипептидным участком Gly3-Ser4. В конформациях  $B_2B_{21}BB_{32}RR_1$  и  $B_2B_{21}BB_{32}BB_3$  возникает эффективные взаимодействия между остатками Тур6-Ser4 (рис. 1в, 1д).

В конформации  $B_1R_{21}RR_{32}LB_3$  шейпа effee с относительной энергией 1,4 ккал/моль второй, третий и четвертые аминокислотные образуют свернутую форму основной цепи, первый, пятый и шестой аминокислотные остатки имея развернутую форму основной отходят от них (рис. 1с). В этой конформации первый аминокислотный остаток Тур1 в прстрансве так расположен, что одновременно эффективно взаимодействует следующим пентапептидным фрагментом Leu2-Gly3-Ser4-Gly5-Тур6-ОН молекулы лактоферроксина А. Тур6 эффективно взаимодействует с аминокислотными остатками Ser4-Gly5. Относительные энергии низкоэнергетических конформации молекулы лактоферроксина А представленные в таблице 2 друг от друга резко не отличаются, потому что, в аминокислотный состав молекуле входят аминокислотные остатки с лабильными, полярными и многоатомными боковыми цепями, которые в разных конформациях способны создать эффективные межмолекулярные взаимодействия.

**Таблица 1.** Относительная энергия и энергетические вклады невалентных ( $U_{нев.}$ ), электростатических ( $U_{эл.}$ ), торсионных ( $U_{торс.}$ ) взаимодействий предпочтительных конформаций молекулы лактоферроксина А

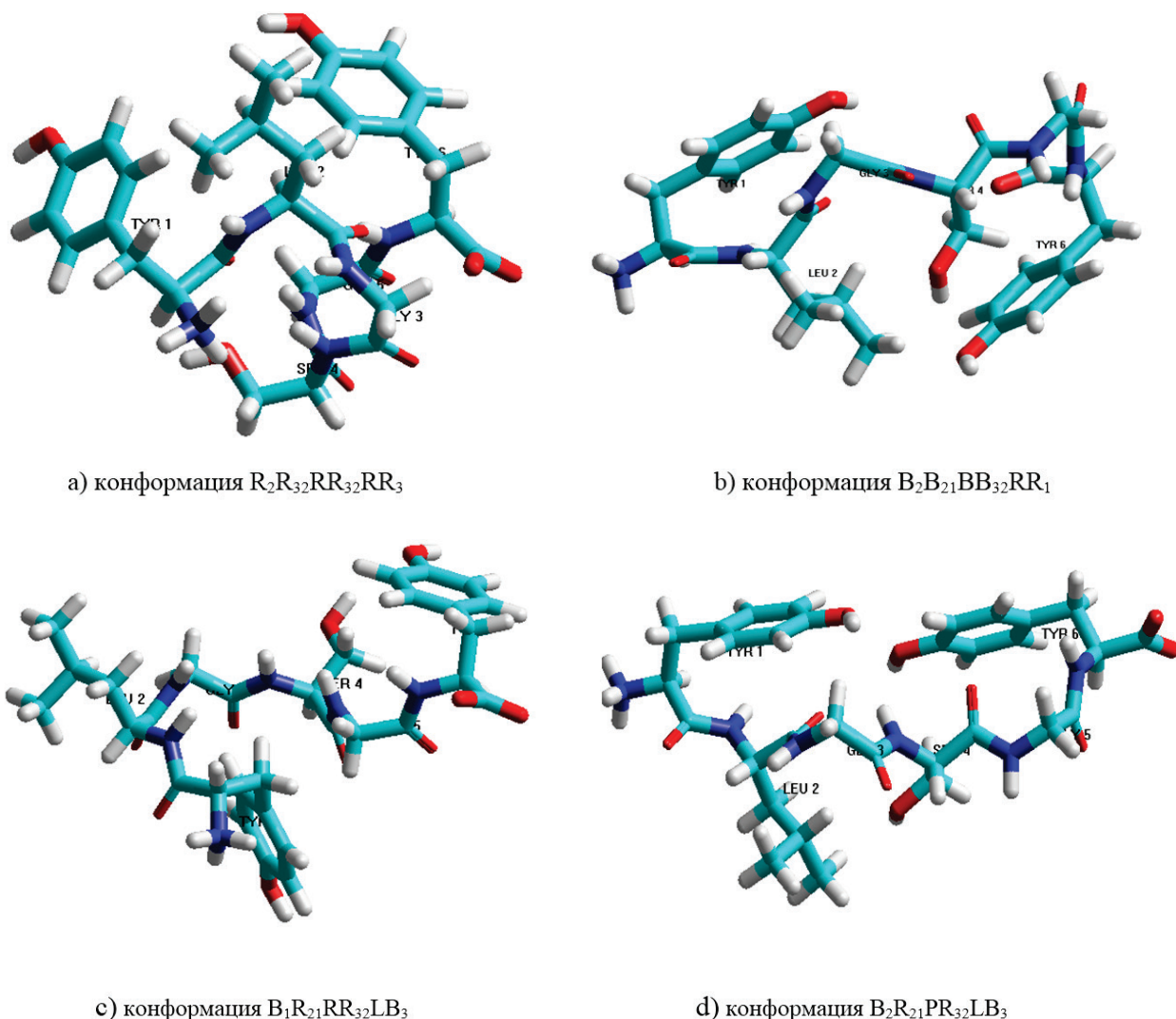
№	Шейп	Конформация	$U_{нев}$	$U_{эл}$	$U_{торс}$	$U_{общ}$	$U_{отн}$
1	ffff	R <sub>2</sub> R <sub>32</sub> RR <sub>32</sub> RR <sub>3</sub>	-23,8	6,6	4,1	-13,1	0
2	fffee	R <sub>2</sub> R <sub>32</sub> RR <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>	-21,7	6,8	3,9	-11,0	2,1
3	ffeff	R <sub>2</sub> R <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> PR <sub>1</sub>	-19,3	5,3	3,4	-10,5	2,5
4	feeff	R <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> PR <sub>1</sub>	-18,6	4,9	3,6	-10,0	3,1
5	feef	R <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> RR <sub>1</sub>	-18,0	5,3	3,5	-9,2	3,9
6	feeee	R <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> BB <sub>3</sub>	-16,1	4,9	3,0	-8,2	4,9
7	eeef	B <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> RR <sub>1</sub>	-20,6	4,8	3,6	-12,2	0,9
8	eeeff	B <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> PR <sub>3</sub>	-20,3	4,7	3,5	-12,1	1,0
9	effee	B <sub>1</sub> R <sub>21</sub> RR <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>	-19,7	5,3	2,6	-11,7	1,4
10	eefee	B <sub>2</sub> R <sub>21</sub> PR <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>	-19,3	5,2	2,7	-11,4	1,7
11	eeeee	B <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> BB <sub>3</sub>	-19,0	4,5	3,2	-11,4	1,7
12	effef	B <sub>1</sub> R <sub>21</sub> RR <sub>32</sub> RR <sub>3</sub>	-19,1	5,2	2,6	-11,2	1,9
13	eefef	B <sub>2</sub> R <sub>21</sub> PR <sub>32</sub> PR <sub>2</sub>	-17,4	5,0	2,3	-10,4	2,7
14	eeefe	B <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>	-17,9	4,7	2,9	-10,2	2,9

**Таблица 2.** Геометрические параметры (град.) оптимальных конформаций молекулы лактоферроксина А

Остаток	R <sub>2</sub> R <sub>32</sub> RR <sub>32</sub> RR <sub>3</sub>	B <sub>2</sub> B <sub>21</sub> BB <sub>32</sub> RR <sub>1</sub>	B <sub>1</sub> R <sub>21</sub> RR <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>	B <sub>2</sub> R <sub>21</sub> PR <sub>32</sub> LB <sub>3</sub>
Tyr1	-71 -59 172 -176 84 0	-64 149 174 171 77 0	-72 66 -179 65 88 0	-66 149 174 171 78 0
Leu2	-72 -49 175 -57 175 -175 180	-121 130 178 177 65 178 176	-96 -66 -174 173 61 179 176	-122 127 177 176 65 179 176
Gly3	-60 -30 -177	-72 81 179	-93 -71 -172	-71 84 180
Ser4	-75 -51 -175 -56 -179	-107 151 174 -61 179	-109 -57 -179 -62 180	-108 146 180 -60 179
Gly5	-76 -52 180	-67 -36 177	90 90 180	-80 120 180
Tyr6	-91 -60 -180 -59 90 0	-83 -37 180 65 85 0	-100 140 180 -60 90 0	-100 140 180 -60 90 0
$U_{отн}$	0	0,9	1,4	1,7

Трёхмерная структура молекулы лактоферроксина В (H-Arg1-Tyr2-Tyr3-Gly4-Tyr5-OH) была исследована фрагментарно. Сначала, на основе низкоэнергетических конформаций соответствующих аминокислотных остатков была изучена пространственная структура N-концевого трипептидного фрагмента H-Arg1-Tyr2-Tyr3 и C-концевого трипептидного фрагмента Tyr3-Gly4-Tyr5-OH молекулы лактоферроксина В и определены их стабильные конформации. Затем на основе низкоэнергетических конформаций N- и C-концевых трипептидных участков была рассчитана пространственная структура всей молекулы лактоферроксина В.

Для исследования пространственной структуры молекулы лактоферроксина В на первом этапе были рассчитаны несколько сот конформаций. Результаты расчета показали, что возникает энергетическая дифференциация между конформациями, формами основной цепи и шейпами. В энергетический интервал (0-5,0) ккал/моль попадают конформации одиннадцати шейпов пептидного скелета. Из каждого шейпа выбраны самые стабильные конформации, которые представлены в таблице 1. Здесь указаны энергетические вклады невалентных ( $U_{нев}$ ), электростатических ( $U_{эл}$ ), торсионных ( $U_{торс}$ ) взаимодействий и относительная ( $U_{rel}$ ) энергия оптимальных конформаций молекулы лактоферроксина В. Энергия невалентных взаимодействий в низкоэнергетических конформациях изменяется в энергетическом интервале (-18,2)–(-13,6) ккал/моль, электростатических взаимодействий (1,8)–(7,2) ккал/моль, торсионных взаимодействий (0,2)–(2,9) ккал/моль (табл. 1). Низкоэнергетические конформации по структуре N-концевого трипептидного фрагмента можно разделить на четыре группы. Первые четыре конформации относятся к шейпу ff, относительная энергия которых изменяется в энергетическом интервале (0–1,3) ккал/моль, две конформации шейпа ef, относительная энергия



**Рисунок 1.** Стабильные конформации молекулы лактоферроксина А

которых изменяется в энергетическом интервале (0,9–2,5) ккал/моль, две конформации шейпа fe, относительная энергия которых изменяется в энергетическом интервале (2,1–3,9) ккал/моль и три конформации шейпа ee, относительная энергия которых изменяется в энергетическом интервале (1,7–3,0) ккал/моль (табл. 1).

Глобальной конформацией молекулы лактоферроксина В является конформация R<sub>2221</sub>R<sub>1</sub>B<sub>2</sub>PB<sub>1</sub> шейпа ffff. В этой конформации возникают водородные связи между атомом N-H Arg1 и C=O атомом основной цепи Tyr5, между атомом C=O основной цепи Tyr3 и атомом N-H основной цепи Tyr5. Здесь образуется свернутая структура, при этом возникают эффективные взаимодействия между атомами основной цепи и боковыми цепями аминокислотных остатков (рис. 1а). Второй низкоэнергетической конформацией молекулы лактоферроксина В является конформация R<sub>2221</sub> R<sub>1</sub> R<sub>2</sub> L R<sub>3</sub> шейпа ffee с относительной энергией 0,4 ккал/моль. В этой структуре первые три аминокислотных остатка образуют свернутую основную цепь, последние два аминокислотных остатка образуют развернутую форму основной цепи. В этой конформации вклад невалентных взаимодействий наибольший. Конформация B<sub>1221</sub>R<sub>1</sub>B<sub>2</sub>LB<sub>1</sub> шейпа efte имеет относительную энергию 0,9 ккал/моль выгодна по электростатическим взаимодействиям (табл. 1, рис. 1в).

Первичные структуры лактоферроксина А и В резко отличаются. Лактоферроксин А состоит из шести аминокислотных остатков, а лактоферроксин В включает пять аминокислотных остатков. У лактоферроксина А аминокислотная последовательность включает по два остатка Tyr и Gly, а у лактоферроксина В имеет место три остатка Tyr и один остаток Gly. Сравнение полученных низкоэнергетических конформаций лактоферроксинов А и В показывает, что у них достаточно много общего. В маленький энергетический интервал 0–3,0 ккал/моль у этих молекул попадают много конформаций (табл. 1, 3). Лактоферроксин А представлен 14-ю, а лактоферроксин В – 11-ю конформациями. В обеих молекулах глобальной является полностью свернутая конформация шепа ffff.



- Tarakanova Yu.N., Dadayan A.K., Zolotarev Yu.A., Grachev S.A., Mikheeva I.G., Zozulya A.A. The possible role of casomorphin in the pathogenesis of autism. *Psixiatriya*, 2010, vol. 46, no. 3, pp. 29-35 (In Russ.)]
3. Sienkiewicz-Szlapka E., Jarmolowska B., Krawczuk S., Kostyara E. Contents of agonistic and antagonistic opioid peptides in different cheese varieties. *Int. Dairy J.*, 2009, vol. 19, no. 4, pp. 258-263.
  4. Ахмедов Н.А. Теоретический конформационный анализ молекул  $\beta$ -казоморфина, валмуцептина и морфицептина. *Молекулярная Биология*, 1989, т. 23, с. 240-248 [Akhmedov N.A. Theoretical conformation analysis of  $\beta$ -casomorphin, valmucseptin and morphiceptin molecules. *Molecular Biol.*, 1989, vol. 23, pp. 240-240 (In Russ.)].
  5. Ахмедов Н.А., Годжаев Н.М., Сулейманова Е.В., Попов Е.М. Структурная организация молекул [Met] энкефалина и эндорфинов. *Биоорганическая химия*, 1990, т. 16, с. 649-667 [Akhmedov N.A., Godjaev N.M., Suleymanova E.V., Popov E.M. Structural organization of the [Met] enkephalin and endorphins molecules. *Bioorganic Chemistry*, 1990, vol. 16, pp. 649-667 (In Russ.)].
  6. Гаджиева Ш.Н., Ахмедов Н.А., Масимов Э.А., Годжаев Н.М. Пространственная структура молекулы Thr-Pro-Ala-Glu-Asp-Phe-Met-Arg-Phe-NH<sub>2</sub>. *Биофизика*, 2013, т. 58, вып. 4, с. 587-590 [Gadjieva Sh.N., Akhmedov N.A., Masimov E.A., Godjaev N.M. Spatial Structure of Thr-Pro-Ala-Glu-Asp-Phe-Met-Arg-Phe-NH<sub>2</sub>. *Biophysics*, 2013, vol. 58, pp. 587-590 (In Russ.)].
  7. Akhmedov N.A., Ismailova L.I., Abbasli R.M. et al. Spatial Structure of Octarphin molecule. *IOSR J. Applied Physics (IOSR-JAP)*, 2016, vol. 8, pp. 66-70.
  8. Ismailova L.I., Abbasli R.M., Akhmedov N. Computer Modeling of the Spatial Structure of Nonapeptide Molecule. *COIA 2020, Baku, Azerbaijan*, vol. I, pp. 218-221.
  9. Akhmedov N.A., Agayeva L.N., Akverdieva G.A., Abbasli R.M., Ismailova L.I. Spatial structure of the ACTH-(6-9)-PGP molecule. *J. Chem. Soc. Pak.*, 2021, vol. 43, no. 05, pp. 500-504.
  10. Akhmedov N.A., Agayeva L.N., Akhmedova S.R., Abbasli R.M., Ismailova L.I. Spatial structure of the  $\beta$ -Casomorphin-7 Molecule. *IOSR Journal of Applied Physics (IOSR-JAP)*, 2021, vol. 13, iss. 5, ser. II (Sep.Oct.), pp. 62-67, doi: 10.9790/4861-1305026267.
  11. Agayeva L.N., Abdinova A.A., Akhmedova S.R., Akhmedov N.A. Spatial Structure of the ACTH-(7-10) Molecule. *Biophysics*, 2021, vol. 66, no. 4, pp. 531-534.
  12. Akhmedov N.A., Abbasli R.M., Agayeva L.N., Ismailova L.I. Three-dimensional structure of exorphin B5 molecule. *Conference proceedings Modern Trends In Physics*, 2019, pp. 201-104.
  13. IUPAC-IUB. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*. Blackwell Scientific, Oxford, 1993.

**STRUCTURAL ORGANIZATION OF LACTOFERROXIN MOLECULES**  
**Agayeva L.N., Abdinova A.A., Akhmedova S.R., Akhmedov N.F., Akhmedov N.A.**

Baku State University

Zahid Khalilov str. 23, Baku, Azerbaijan

Azerbaijan State Pedagogical University

Uzeyir Hajibeyov str. 34, Baku, Azerbaijan

Azerbaijan Technical University

Z. Khalilov str. 23, Baku, AZ-1148, Azerbaijan; e-mail: leylanamig@mail.ru.

Received 23.06.2023. DOI: 10.29039/rusjbc.2023.0585

**Abstract.** The conformational possibilities of lactoferroxin A (H-Tyr1-Leu2-Gly3-Ser4-Gly5-Tyr6-OH) and lactoferroxin B (H-Arg1-Tyr2-Tyr3-Gly4-Tyr5-OH) molecules were studied by theoretical conformational analysis. The potential energy of the system is chosen as the sum of non-valence, electrostatic and torsion interactions and the energy of hydrogen bonds. The low-energy conformations of molecules, the dihedral angles of the main and side chains of amino acid residues that make up the molecule were found, and the energy of intra- and interresidual interactions was estimated. It is shown that the spatial structure of the lactoferroxin A molecule is represented by fourteen forms of the main chain, and the spatial structure of the lactoferroxin B molecule by eleven forms of the main chain. Comparison of the obtained low-energy conformations of lactoferroxins A and B shows that they have quite a lot in common. In a small energy range of 0–3,0 kcal/mol, these molecules have many conformations. Therefore, it is precisely this that explains the fact that both molecules perform a common biological function. It can be assumed that tyrosine amino acid residues are involved in the performance of the biological function. In similar conformations, their side chains in space are approximately in the same positions. The results obtained can be used to elucidate the structural and structural-functional organization of lactoferroxin molecules.

**Key words:** exorphin, lactoferroxin, opioid, structure, conformation.