

## BÖLMƏ 2 İSTİLİK FİZİKASI

### ALA1-ARG2-PRO3 TRIPEPTİD FRAQMENTİNİN FƏZA QURULUŞUNUN TƏDQIQI

O.G.Güləhmədov<sup>1</sup>, L.İ.Vəliyeva \*  
Bakı Dövlət Universiteti,  
Fizika fakültəsi, II kurs (magistrant)

*Tədqiqat işinin məqsədi allatostatin 6 molekulunun Ala1-Arg2-Pro3 tripeptid fraqmentinin fəza quruluşunun tədqiq edilməsindən ibarətdir. Hesablamalarda fraqmentin fəzada tuta biləcəyi bütün mümkün hallar nəzərdən keçirilmiş, onun enerji və həndəsi parametrləri öyrənilmiş, həmçinin yan zəncirlərinin ikiüzlü bucaqlarının dəyişmə hədləri kəmiyyətcə qiymətləndirilmişdir.*

Hesablamalarda nəzəri konformasiya analizi üsulundan istifadə edilmişdir. Bu üsula əsasən ixtiyari molekul atomlar sistemi kimi götürülür və bu zaman onun nüvə-elektron quruluşu nəzərə alınmır. Burada istifadə olunan yarımempirik potensial funksiyalar və onların parametrləri [1-3] işlərindən götürülmüşdür, nəticələri şərh etmək üçün standart identifikatorlar sistemindən istifadə olunmuşdur. Hesablamalar apararkən ikiüzlü bucaqların qiymətləri standart nomenklaturaya uyğun götürülür.

Gördüyümüz kimi bu tripeptid fraqmenti polyar yan zəncirə malik arginin amin turşusundan, suda həll olmayan və hidrofob amin turşuları qurupuna daxil olan alanin və prolin amin turşularından ibarətdir. Arginin (Arg) amin turşusunun yan zənciri müsbət yükləndiyinə görə o, həmişə zülal qlobulunun kənarında yerləşir və zülalın suda həll olma faizini artırır. Bundan başqa, digər amin turşularına nisbətən, Arg daha çox kənar təsirlərə məruz qaldığı üçün parçalanmaya da meyillidir. Ala1-Arg2-Pro3 tripeptid fraqmentinin konformasiya analizini aparmaq üçün 162 ilkin variant yığılaraq hesaba buraxılmışdır. Hesablamalardan aydın olur ki, tədqiq edilmiş 162 konformasiyadan yalnız 23-ü enerji cəhətcə əlverişli konformasiyalardır. Bunlardan 0÷3 kkal/mol nisbi enerji intervalına 13 konformasiya düşür. Əlverişli konformasiyalardan 11-i fe şəypinə, 8 isə ee şəypinə mənsubdur (cə.d.1). Digər konformasiyalar enerji cəhətcə əlverişli olmadıqlarına görə bütöv molekulun fəza quruluşu tədqiq edilən zaman onlar nəzərə alınmayacaqlar.

Cədvəl 1

#### Ala1-Arg2-Pro3 tripeptid fraqmentinin optimal konformasiyalarında enerjiyə görə paylanma

Şeyp	Nisbi enerji intervalı, kkal/mol					Konformasiyaların ümumi sayı
	0÷1	1÷2	2÷3	3÷5	>5	
fe	2	3	2	4	-	11
ee	2	1	3	2	-	8
ef	-	-	-	1	3	4
ff	-	-	-	-	-	-

<sup>1</sup> orxangulehmedov0@gmail.com

**Ədəbiyyat**

1. Momany, F.A., McGuire R.F., Burgess, A.W., Scheraga, H.A. "Energy parameters in polypeptides: VII. Geometric parameters partial atomic charges, nonbonded interaction for naturally occurring amino acid" (1975) *J.Phys.Chem.*, 79, 2361-2381.
2. Popov, E.M. *The Structural Organization of Proteins* (in Russian), Nauka, Moscow, 1989, 352 pp.
3. IUPAC-IUB Commision on Biochemical Nomenclature Abbreviations and symbols for description of conformation of polypeptide chains (1974) *Pure Appl. Chem.*, 40, 291-308