

GLY-PRO-ARG-THR-TYR-NH₂ PENTAPEPTİDİN KONFORMASIYALARININ ENERJİLƏRİNƏ GÖRƏ PAYLANMASI

G.İ.Rüstəmli^{1*}, Ü.T.Ağayeva^{2}, N.M.Qocayev^{**}**
*** Bakı Dövlət Universiteti, **“Fizika problemləri” ETİ**

Molekulyar biofizikanın mühüm problemlərindən biri də bioloji molekulların və onların komplekslərinin fəza quruluşlarını tədqiq etməkdən ibarətdir. Müxtəlif biomolekullardan ibarət olan canlı orqanizmlərdə baş verən bütün proseslər həmin molekulların fəza quruluşları və bu quruluşların dəyişmə imkanları ilə əlaqədardır.

Öyrənmənin ilk mərhələsi onu təşkil edən biomolekulların konformasiya analizini aparmaqdan ibarətdir. Orqanizminin bir çox funksiyalarının tənzimlənməsində, o cümlədən, həşaratların ontogenez prosesində mühüm rol oynayan bioloji fəal birləşmələrdən biri də «*Shistogерka Gregaria*» səhra çəyirtkəsindən izolə edilmiş və şistostatinlər sinfinə aid olan şistostatin-8(SGS-AST-8) neyropeptididir. Bu sinfə daxil olan bütün neyropeptidlərin son uclu tripeptid fraqmenti- Gly-Pro-Arg-Thr-Tyr-NH₂ pentapeptidin olduğu və məhz bu fraqmentin bioloji fəal olduğu bir çox müəlliflərin işlərində qeyd olunur. Diqqəti cəlb edən əsas məsələ kiçik enerjili konformasiyaları stabilləşdirən enerji paylarının müəyyənəndirilməsi olmuşdur.

Aparılan tədqiqatlar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, **efff** şeypinə mənsub olan LRR₃R₃R₁ qlobal konformasiyanın stabilləşməsində qeyri-valent (van-der-vaals) qarşılıqlı təsir enerjisi əsas rol oynayır. Bu qarşılıqlı təsir enerjisinin qiyməti -21,75 kkal/mol-dur. Torsion və elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjiləri də stabilləşdirici təsir göstərir. Onların payları müvafiq olaraq 1,68 kkal/mol və 2,07 kkal/mol-dur. Həmin **efff** şeypinə mənsub olan və enerjisinə görə növbəti konformasiya olan BRR₁R₁R₁ konformasiyasında da qeyri-valent (van-der-vaals) qarşılıqlı təsir enerjisi əsas rol oynayır. Bu qarşılıqlı təsir enerjisinin qiyməti -23,22 kkal/mol-dur. Göründüyü kimi, bu qarşılıqlı təsir enerjisi qlobal konformasiyadakında 1,47 kkal/mol qədər üstündür. BRR₁R₁R₁ konformasiyasında elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin payları uyğun olaraq 2,61 kkal/mol və 2,82 kkal/mol təşkil edir. BRR₁R₁R₁ konformasiyasının nisbi enerjisi qlobal konformasiyanın ümumi enerjisindən 0,21 kkal/mol qədər çoxdur. Qlobal konformasiya ilə eyni **efff** şeypinə mənsub olan digər konformasiya və enerjisinə görə növbəti konformasiya LRR₂R₃B₁ konformasiyasıdır. Bu konformasiyanın stabilləşməsində də həlledici rolu qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi (20,23 kkal/mol) oynayır. Digər şeyplərə mənsub olan konformasiyaların stabilləşməsində iştirak edən enerji növlərinin qiymətləri də uyğun olaraq müəyyənəndirilmişdir.

Ədəbiyyat

1. Г.А.Агаева, Н.М.Годжаев, Агаева У.Т. Структурный анализ фрагментов и аналогов молекулы гемокинина-1 человека. Материалы I Научно-практической конференции с международным участием «Фармацевтическая наука и практика: проблемы, перспективы, развития», 24-25 апреля 2016, Харьков, с.18-19

¹ gulaymemmedli28@gmail.com,

² ahaeva1976@mail.ru

2. Г.А.Агаева, Агаева У.Т. Электронные характеристики пространственных структур адресных фрагментов молекул гемокинина-1 человека и гемокинина-1 мыши/крысы. IV International Scientific Conference of Young Researchers Proceedings. Qafqaz University 29-30 april 2016, p. 23-25
3. Г.А.Агаева, Н.М.Годжаев, Агаева У.Т. Исследование пространственного строения и конформационные особенности молекулы гемокинина-1 мыши/крысы Аз.ТУ, Ученые записки №1, 2018, стр.42-51