

BÖLMƏ 2 BİOFİZİKA VƏ MOLEKULYAR FİZİKA

ŞİSTOSTATİN 3 MOLEKULUNUN TRİPEPTİD FRAQMENTİNİN TƏDQIQI

Amanova N.M., Vəliyeva L.İ.

Bakı Dövlət Universiteti
amanovanermin00@gmail.com

Şistostatin molekulu 12 amin turşu qalığından ibarət olub, Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5-Ser6-Lleu7-Tyr8-Ser9-Phe10-Gly11-Leu12-NH₂ xətti ardıcılığından ibarətdir. Bu molekulu tədqiq etmək üçün, o kiçik fraqmentlərə bölünmüşdür. İlk növbədə bütün bu fəsilədən olan molekullar üçün eyni ardıcılığa malik Phe10-Gly11-Leu12-NH₂ tripeptid hissənin həndəsi və enerji parametrləri öyrənilmişdir.

Hesaba bu fraqmentin fəzada tuta biləcəyi bütün mümkün halları (formaları) nəzərə alan 324 konformasiya buraxılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, 324 konformasiyadan yalnız 40-ı (0÷3) kkal/mol nisbi enerji intervalına düşür. Bunlar içərisində 10 konformasiya tam açıq formalı, 7 konformasiya tam bükük formalı, 23 konformasiya isə yarıaçıq formalı konformasiyalardır. Cədvəldə bu konformasiyaların φ , ψ , ω və χ ikiüzlü bucaqlarının fəzada aldıkları qiymətlər, onların sxematik olaraq görünüşləri, və həmçinin enerji parametrləri verilmişdir.

Cədvəl

Konformasiya və onun sxematik görünüşü	Amin turşusu	İkiüzlü bucaqlar (°)					Enerji parametrləri (kkal/mol)			
		φ	ψ	χ_1	χ_2	ω	$E_{q.v.}$	$E_{elst.}$	E_{tor}	E_{tam}
 açıq	Phe	-110	154	188	91	182	-11.7	1.3	1.4	-8.9
	Gly	-74	83	-	-	175				
	Met	-101	-61	-57	170	180				
 bükük	Phe	-97	148	181	87	185	-11.5	1.2	1.7	-8.7
	Gly	79	-62	-	-	173				
	Met	-96	-53	-53	176	178				
 yarıaçıq	Phe	-109	-60	180	90	178	-11.8	1.4	1.0	9.4
	Gly	-78	73	-	-	183				
	Met	-103	-61	-51	177	179				

Cədvəldən aydın olur ki, enerji cəhətdən ən əlverişli (qlobal) konformasiya yarıaçıq formalı konformasiyadır. Onun tam enerjisinin qiyməti -9.4 kkal/mol-a, qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin qiyməti -11.8 kkal/mol-a, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin qiyməti 1.4 kkal/mol-a və valent rabitələr ətrafında fırlanma enerjisinin (E_{tor}) qiyməti isə 1.0 kkal/mol-a bərabərdir. Tam açıq formaya uyğun konformasiya qlobal konformasiyadan ~ 0,5 kkal/mol, tam bükük formaya uyğun konformasiya isə qlobal konformasiyadan ~ 0,7 kkal/mol qədər fərqlənir. Bundan başqa, ikiüzlü bucaqların qiymətlərindən aydın olur ki, Phe amin turşusundan sonra Gly amin turşusunun gəldiyi üçün tam açıq və tam bükük formalı konformasiyalarda β -bükük əmələ gəlir.

Ədəbiyyat:

1. Veelaer, D., B.Devreese, et al. (1996). Isolation and characterization of eight myoinhibiting peptides from the desert locust, *Schistocerca gregaria*: New members of the cockroach allatostatin family. *Molecular and Cellular Endocrinology* 122(2): 183-190
2. Попов Е.М. Структурная организация белков, М., "Наука", 1989, 352 с
3. IUPAC-IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature. *J. Biol. Chem.*, 1983, v.260, p.14-42