

LYS-GLN-PRO TRIPEPTİD MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞUNUN STABİLLƏŞMƏSİNDƏ MÜXTƏLİF QARŞILIQLI TƏSİR NÖVLƏRİNİN ROLU

Şükürova J.Z, Qocayev N.M., Ağayeva Ü.T.

Bakı Dövlət Universiteti

nqocayev@beu.edu.az, ahaeva1976@mail.ru, jala.shukurova.98@mail.ru

Orqanizmlərdə maddə mübadiləsi prosesində mühüm rol oynayan Lys-Gln-Pro molekulunun stabil konformasiyalarını formalaşdırən qeyri-valent (van-der-vaals), elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin qiymətləri müəyyən edilmişdir(cədvəl 1).

Cədvəl 1. Lys-Gln-Pro-COO tripeptid molekulunun kiçikenerjili konformasiyasının stabilləşməsindəki enerji payları

Seyplər	Konformasiya	E _{q.v.}	E _{e.st.}	E _{tors.}	E _{ümumi}	E _{nisbi}
Ee	B ₁₂₂₂₂ B ₂₁₂ B	-5.94	0.65	1.74	-4.85	0
	B ₁₂₂₂₂ B ₂₃₂ B	-6.3	-0.3	2.41	-4.15	0.7
	B ₁₂₂₂₂ B ₂₂₁ B	-4.85	-0.3	1.5	-3.63	1.22
	B ₂₂₂₂₂ B ₃₁₂ B	-8.8	1.95	3.27	-3.58	1.25
	B ₁₂₂₂₂ B ₃₃₂ B	-8.9	2.8	3.62	-2.54	2.31
	B ₃₂₂₂₂ B ₂₁₂ B	-7.4	2.02	3.05	-2.30	2.55
	B ₃₂₂₂₂ B ₂₃₂ B	-6.7	2.40	2.55	-1.74	3.14
fe	R ₃₂₂₂₂ B ₂₁₂ B	-8.6	-0.01	3.95	-4.62	0.23
	R ₃₂₂₂₂ B ₂₂₁ B	-8.18	-0.90	4.5	-4.11	0.74
	R ₂₂₂₂₂ B ₂₂₁ B	-6.13	0.44	3.42	-3.16	1.7
	R ₁₂₂₂₂ B ₂₁₂ B	-6.4	0.4	4.04	-1.94	2.9
	R ₂₂₂₂₂ B ₂₁₂ B	-6.73	-1.1	5.27	-2.55	2.3

Cədvəldən göründüyü kimi, ümumi enerjisi -4.85 kkal/mol konformasiya ən kiçik enerjili konformasiyadır. Belə konformasiyaya qlobal konformasiya adlanır. Global konformasiyanın stabilləşməsində rol oynayan 3 növ qarşılıqlı təsir enerjilərinin ümumi enerjiyə verdikləri paylar göstərilmişdir. Bu cədvəldən göründüyü kimi, molekulun ümumi enerjisinin -5,94 kkal/mol miqdarı (enerji mənfə olduğu görə stabilləşdirici pay) qeyri valent (van-deer-vaals) qarşılıqlı təsir hesabına, 0,65 kkal/mol miqdarı (destabilləşdirici pay) elektrostatik qarşılıqlı təsir hesabına, 1,74 kkal/mol miqdarı (destabilləşdirici) isə torsion qarşılıqlı təsir hesabına əldə edilmişdir. Lys-Gln-Pro tripeptidinin digər nisbətən kiçikenerjili 11 konformasiyanın stabilləşmədə hər 3 qarşılıqlı təsirin enerji payları da cədvəl 1-də verilmişdir. Həmin cədvəldən göründüyü kimi, bütün konformasiyalarda torsion enerjinin qiymətləri müsbətdir. Bu o deməkdir ki, Lys-Gln-Pro-COO tripeptid molekulunun bütün stabil konformasiyalarında torsion qarşılıqlı təsir destabilləşdiricidir.

Nəticələr:

1. Lys-Gln-Pro-COO tripeptid molekulunun konformasiya analizi aparılmışdır.
2. Kiçikenerjili konformasiyasının stabilləşməsindəki qeyri-valent, elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsirlərinin enerji payları təyin olunmuşdur.

Ədəbiyyat:

1. Laponen J. Angiotensin converting enzyme inhibitory peptides in Finnish cereals a database survey. Agricultural and Food Science, 2004, Vol 1, p.35-45