

PENTAPEPTİD MOLEKULUN FƏZA QURULUŞUNUN TƏDQIQI

Əhmədova A.R., Abbasova G.C.

Bakı Dövlət Universiteti
aysune303@gmail.com

Təbii peptid molekulları yüksək spesifikliyi, kiçik konsentrasiyalarda belə təsir göstərmək qabiliyyətinə malikdirlər. Bu xassə liqand və ona uyğun reseptorun mütəhərrik konformasiyaları ilə təyin olunur. Qarşılıqlı təsirdə olan molekulların sferik cəhətdən uyğunluğu fəza quruluşunun spesifikliyi ilə, peptid molekulunun dinamik konformasiyalarının xassələri izah olunur. Peptid molekulunun kimyəvi quruluşu və konformasiya xassələri arasında asılılıqlar təyin olunmuşdur ki, bu da peptid molekulunun funksiyalarını öyrənmək üçün zəruridir. Verilmiş işdə tədqiq edilmiş peptid fraqmenti lazımı peptidlərdəndir.

Tyr-Ala-Gly-Ala-Val pentapeptid fraqmentin hesablamaları göstərir ki, əsas zəncirin forma və şeypləri arasında güclü energetik differensasiya baş verir. 0-5 kkal/mol enerji intervalına pentapeptid fraqmentin əsas zəncirinin 13 şeypinin 32 forması düşür. Pentapeptid fraqmentin əsas zəncirinin ϕ, ψ, ω yan zəncirlərin xikiüzlü bucaqlarının qiymətləri beş optimal konformasiyalar üçün hesablanmışdır. Eyni zamanda, beş konformasiya üçün daxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsir enerjilərinin qiymətləri də təyin edilmişdir. Tyr-Ala-Gly-Ala-Val molekulunun qlobal konformasiyası eeff şeypinin B₂PRR₂ forması olmuşdur. Bu konformasiyanın aşağıdakı qarşılıqlı təsirləri ümumi enerjiyə müəyyən pay verirlər: Tyr1 – Ala2 – 2,3 kkal/mol, Tyr1- Gly3 – 2,7 kkal/mol, Ala2-Ala4 – 1,5 kkal/mol, Ala2-Val5 – 2,4 kkal/mol, Ala4- Val5 – 1,6 kkal/mol. Bu qarşılıqlı təsirlər məhz həmin konformasiyanı sabitləşdirir. eeff şeypi əsas zəncirin dörd aşağıenerjili formasından ibarətdir. Digər aşağıenerjili konformasiya 3,0 – 4,5 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. f f f şeypinin B₂LPRR₂ konformasiyasının nisbi enerjisi qlobal konformasiyanın enerjisindən 1,0 kkal/mol qədər yüksəkdir. Bu konformasiyada Tyr1 – Ala2 qarşılıqlı təsir ümumi enerjiyə -2,1 kkal/mol, Tyr1-Gly3 qarşılıqlı təsir -1,6 kkal/mol, Tyr 1 – Ala 4 – 1,9 kkal/mol, Tyr1-Val 5 – 2,5 kkal/mol, Ala2-Val 5 – 1,2 kkal/mol, Ala4-Val 5 – 1,5 kkal/mol qədər enerji verərək bu konformasiyanı sabitləşdirir. f f f şeypinin digər iki aşağıenerjili konformasiyaları daha yüksək enerjiyə - 4,3 və 4,4 kkal/mol qədər enerjiyə malikdirlər.

Tyr-Ala-Gly-Ala-Val amin turşu qalıqları ardıcılığı özünəməxsus xüsusiyyətlərə malikdir. Bu fraqment yan zəncirə malik olmayan qlisindən, kiçik yan zəncirə malik olan alaninlərdən ibarətdir. Ardıcılığa daxil olan valinin isə yan zənciri kifayət qədər həcmlidir. Bu amin turşu qalıqlarının bu və ya digər konformasiya verdiyi pay çox böyük deyil.

Ədəbiyyat:

1. Аббасова Г.Д., Ахмедов Н.А. Пространственная структура молекулы Н-Тир-Ала-Гли-Вал-Вал-Асп-Асп-Лей-ОН // Физиканың актуал проблемлери, Баки Дöвлät Университетинин физика фäкүлтäси, I Respublika elmi konfransı, Баки, 2000, s.206-207.

2. Abbasova D., Akhmedov N.A., Abbasly R.M.// Structural Organization of the Subunit 2 C-Terminal Region of Ribonucleotide Reductase from the Herpes Virus and Its Analogs, Russian Journal of Bioorganic Chemistry, vol.24., no.8,2000, p.586-592.
3. Abbasova G.D., Ahmadow N.A., Khalilov R.I.// Structural and functional organization of subunit 2 C-terminal region of herpes virus ribonucleotide reductase, Eastern Medical Journal, 2000, vol.3, N3,4, p.24-28.