

ŞİSTOSTATİN-3 MOLEKULUNUN ÖN UCLU ALA1-THR2-GLY3-ALA4-ALA5 FRAQMENTİNİN FƏZA QURULUŞUNUN ƏSAS ELEMENTLƏRİ

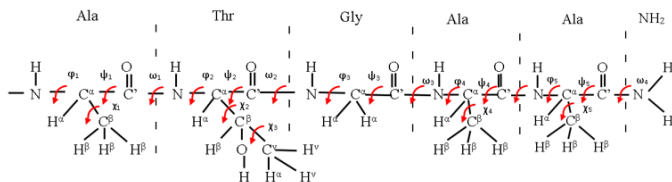
Amanova N.M., Vəliyeva L.İ.

Bakı Dövlət Universiteti

amanovanermin00@gmail.com

Şistostatin-3 molekulunun ön uclu Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5 fraqmentinin (şəkil 1) fəza quruluşunun əsas elementlərini – həndəsi və enerji parametrlərini müəyyən etmək üçün nəzəri konformasiya analizi üsulundan istifadə edilmişdir. Nəzəri konformasiya analizi üsuluna görə ixtiyari molekulun fəza quruluşunu tədqiq etmək üçün mərhələli yanaşmadan istifadə olunur. Bu

cür yanaşma həm həddindən artıq çoxlu sayda konformasiyaların hesablanması qarşısını alır, həm də minimizasiya prosesinin sürətlə getməsinə kömək edir [1-3].



Şəkl. 1. Şistostatin-3 molekulunun ön uclu Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5 fraqmentinin amin turşu ardıcılığı

Hesaba 48 variant buraxılmışdır. Enerjinin minimizasiya prosesindən sonra 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalına 26 kiçik enerjili konformasiyanın düşdüyü məlum olmuşdur. Alınmış nəticələrdən aydın olur ki, minimizasiya edilmiş 72 konformasiyadan yalnız 14-ü 0-3 kkal/mol nisbi enerji intervalına düşür. Cədvəl 1-də Şistostatin-3 molekulunun ön uclu Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5 fraqmentinin bəzi konformasiyalarının enerji parametrləri, cədvəl 2-də isə kiçik enerjili konformasiyalarının şeyplərə görə paylanması öz əksini tapmışdır.

Cədvəl 1

Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5 fraqmentinin bəzi konformasiyalarının enerji parametrləri

forma	şeyp	$E_{q.v}$	$E_{el.st}$	E_{tor}	E_{tam}	E_{nisbi}
BL ₃ RRR	feff	-16.84	4.94	1.13	-10.77	0.0
BL ₃ RRB		-16.79	4.15	2.08	-10.55	0.22
RB ₃ RBR	fefe	-15.16	4.15	0.73	-10.27	0.5
RR ₁ PRR	ffff	-16.85	5.70	1.69	-9.46	1.31
BB ₂ PLR	efee	-15.17	5.33	1.87	-9.97	0.8
RB ₂ LBR	feee	-16.38	4.96	1.35	-10.07	0.7

Cədvəl 2

Ala1-Thr2-Gly3-Ala4-Ala5 fraqmentinin
kiçik enerjili konformasiyalarının şeyplərə görə paylanması

şeyp	0-1	1-2	2-3
fefe	1	1	-
efee	-	2	-
fffe	1	-	-
ffff	-	1	1
efee	1	-	1
eeef	-	-	1
eefe	1	-	-
eeff	-	1	1
feef	-	-	1
feff	2	1	-
ffef	-	-	1
feee	1	-	-
efef	1	1	-

Pentapeptid fraqmenti üçün alınmış bütün nəticələr bütöv molekulun fəza quruluşunun müəyyən edilməsində istifadə olunacaqdır.

Ədəbiyyat:

1. Якубке Х.Д., Ежкайт Х. Аминокислота, пептида, белки, М., "Мир", 1985, 456 с.
2. Попов Е.М. Структурная организация белков, М., "Наука", 1989, 352 с.
3. Максумов И.С., Исмаилова Л. И., Годжаев Н. М. "Программа полуэмпирического расчёта конформаций молекулярных комплексов на ЭВМ" //Журнал структурной химии, 1983, т.24, №4, с.147-148