

HELİCOSTATİN 4 NEYROPEPTİDİNİN SON UCLU PRO3-TYR4-SER5-PHE6-GLY7-LEU8-NH₂ HEKSAPEPTİD FRAQMENTİNİN FƏZA QURULUŞUNUN TƏŞKİLİ

Qasimzadə G.T., Vəliyeva L.İ.

Bakı Dövlət Universiteti

gunel.qasimzadeh.2000@mail.ru

Pro3-Tyr4-Ser5-Phe6-Gly7-Leu8-NH₂ heksapeptid fraqmentinin fəza quruluşunun həndəsi və enerji parametrlərini hesablamak üçün Pro3-Tyr4-Ser5-Phe6 və Phe6-Gly7-Leu8-NH₂ fraqmentləri üçün nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə alınmış nəticələrdən istifadə edilmişdir[1].

Bildiyimiz kimi nəzəri konformasiya analizi üsulunun əsasını tarazlıq vəziyyətində olan konformasiyaların hesablanması və onlarla molekulun xassələri arasında bağlılığın müəyyən edilməsi təşkil edir[2]. Hesablama aparmaq üçün Phe6 amin turşusunun ümumi olan formalarından istifadə edilmişdir. Bunun üçün 510 variant yığılmışdır [3-4]. Minimisasiya olunmuş konformasiyaların təhlili nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalına yalnız 11 şeypə mənsub konformasiyalar düşür (cədv.1-2).

Cədvəl 1

Pro3-Tyr4-Ser5-Phe6-Gly7-Leu8 fraqmentinin kiçik enerjili optimal konformasiyalarının enerjiyə görə paylanması

Şeyp	Nisbi enerji intervalı, kkal/mol						Konformasiyaların ümumi sayı
	0÷1	1÷2	2÷3	3÷4	4÷5	5÷10	
ffffe	2	6	5	3	10	4	30
fffff	4	3	1	4	3	2	17
fffef	1	4	2	2	2	3	14
fffee	-	3	1	1	3	5	13
fefef	-	-	-	1	4	3	8
fefee	-	-	-	1	1	3	5
feefe	-	-	-	1	1	3	5
eefee	-	-	-	-	2	2	4
ffefe	-	-	-	-	3	1	4
ffeee	-	-	-	-	2	1	3
feeff	-	-	-	1	-	2	3

Cədvəl 2

Pro3-Tyr4-Ser5-Phe6-Gly7-Leu8 fraqmentinin kiçik enerjili konformasiya halları

Şeyp	konformasiya	Enerji payları, kkal/mol				
		E _{q.val}	E _{el.st.}	E _{tor}	E _{tam}	E _{nisbi}
fffff	RR ₂ R ₁ B ₁ PR ₃	-29.38	1.18	2.82	-25.38	0.00
	RR ₂ R ₂ B ₁ PR ₃	-28.85	1.17	2.49	-25.19	0.19
	RR ₂ R ₁ B ₂ PR ₃	-28.88	0.98	3.07	-24.84	0.54

ffffe	RR ₂ R ₁ B ₁ LB ₃	-29.40	1.96	2.82	-24.63	0.75
	RR ₂ R ₃ B ₃ PL ₃	-27.64	1.02	2.58	-24.04	1.34
fffef	RR ₂ R ₃ R ₁ PR ₃	-29.08	1.27	2.97	-24.84	0.54
	RR ₂ R ₁ R ₂ PB ₃	-27.64	1.49	2.76	-23.40	1.98

Cədvəllərdən aydın olur ki, bu konformasiyalardan ən minimal enerjili konformasiya fffff şəypinə aid R₂R₁B₁PR₃ formalı konformasiyadır ki, onun tam enerjisi - 25.38 kkal/mol-a bərabərdir. Fragment üçün hesablanmış çoxlu sayda kiçik enerjili konformasiyaların əksəriyyətinin məhz peptid zəncirinin bükük formalı quruluş tiplərinə aid olması, bütöv molekulda da bu quruluşun üstünlük təşkil edəcəyini öncədən söyləməyə imkan verir. (fffff şəypindən 17-si, fffff-dən 30-u, fffef-dən 14-ü, fffee-dən 13-ü, fefef-dən 8-i, ffefe-dən 4-ü). Bu fragment üçün alınan bütün nəticələrdən bütöv Helicostatin 4 molekulunun fəza quruluşunun təhlilində istifadə olunacaqdır.

Ədəbiyyat:

1. Davey, M.H.Duve, et al. (1999). "Characterisation of the helicostatin peptide precursor gene from *Helicoverpa argimera*". *Insect Biochemistry and Molecular Biology* 29(12): 1119-1127
2. Шерман С.А., Андрианов А.М., Ахрем А.А. Конформационный анализ и установление пространственной структуры белковых молекул, Мн., "Наука и техника", 1989, с.62-63
3. IUPAC-IUB Joint Commision on Biochemical Nomenclature. *J. Biol. Chem.*, 1983, v.260, p.14-42
4. 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