

PENTAPEPTİD MOLEKULUN VAL-VAL-ASN TRIPEPTİD FRAQMENTİNİN ƏLVERİŞLİ KONFORMASIYALARININ HİDROGEN RABİTƏLƏRİ

Şıxalıyev E.E., Abbasova G.C.

Bakı Dövlət Universiteti

Hidrogen rabitəsinin təbiəti nəzəri olaraq elektrostatik və donor-akseptor təbiətinə əsaslanır. Sokolov nəzəriyyəsinə görə hidrogen rabitəsi hər hansı donor atomu hidrogen akseptor atomunun elektron cütlərinin qarışması nəticəsində yaranır. Hidrogen rabitəsi sistemin enerjisini azaldır. Molekulda sərbəst elektronların sayı çox olduqca mənfi yüklərin qiyməti çox olar. Digər tərəfdən hidrogen rabitəsinin akseptor xüsusiyyəti ondan müsbət yükün üstün olmasıdır.[1]

Nəzəri konformasiya analizi üsuluna əsasən Val-Val-Asn-Asp-Leu pentapeptid molekulunun Val-Val-Asn tripeptid fraqmentinin fəza quruluşu öyrənilmişdir. Fəza quruluşunun yaranmasında hidrogen rabitələrinin rolu böyükdür. Hidrogen rabitələrinin əmələ gəlməsi ilə A-H rabitələrinin valent rəqsləri intensivliyi qiymətcə arta bilər. Maqnit rezonansı nəzəriyyəsinə görə (bu həmçinin təcrübədə də öz təsdiqini tapıb) protonların kimyəvi sürüşməsi hidrogen rabitələrinin quruluşuna hiss olunacaq dərəcədə təsir edir.

Aparılan tədqiqat nəticəsində Val-Val-Asn tripeptid molekulundakı hidrogen rabitələri cədvəldə göstərilmişdir.

Cədvəl 1

Şeyp	Forma	Atomlar	Rabitə uzunluğu	E _{h.r}
ee	B ₁ BB	Val1 (NH).....Val1 (CO)	2.57	-0.19
		Val1 (NH)..... Val2 (CO)	2.87	-0.18
		Val2 (CO).....Val2 (NH)	2.42	-0.27
	B ₂ BB	Val1 (NH).....Asn3(CO)	2.23	-0.14
		Val1(CO).....Asn3(NH)	2.71	-0.15
		Val1(OH).....Val2(CO)	2.75	-0.12
ff	R ₁ RB	Val2 (CO).....Asn3 (NH)	2.48	-0.49
		Val2 (NH).....Asn3 (CO)	2.64	-0.10
		Val1 (CO).....Val1(NH)	2.59	-0.38
	R ₂ RB	Val2 (CO).....Val2 (NH)	2.87	-0.69
		Val1 (NH).....Val1(CO)	2.92	-0.73
ef	B ₁ RR	Val1(NH).....Val2(CO)	2.80	-0.25
		Val2 (CO).....Val2 (NH)	2.25	-0.96
		Val1 (CO).....Val2 (NH)	2.68	-0.71

*“Fizika və astronomiyanın problemləri” Magistrantların və gənc tədqiqatçıların
XXIII Respublika elmi konfransı*

	B ₂ RR	Val1 (NH).....Asn3(CO)	2.22	-0.75
		Val2 (CO).....Asn3(NH)	2.64	-0.43
		Val1 (CO).....Val2(NH)	2.52	-0.73
	B ₂ BL	Val1 (NH).....Val12(CO)	2.57	-0.96
		Val1 (OH).....Asn3(CO)	2.81	-0.69
		Val2 (HH).....Asn2 (CO)	2.59	-0.39

Ədəbiyyat:

1. Аббасова Г.Д. Теоретический конформационный анализ фрагмента Val-Val-Asn-Asp-Leu// Баки Дövlət Universiteti aspirantlarının və gənc tədqiqatçılarının elmi konfransının materialları. Bakı – 1998, səh.25.