

HEPTAPEPTİD MOLEKULUN TRIPEPTİD FRAQMENTİNİN STABİL QURULUŞLARININ TƏDQIQI

Qasimova H.H., Abbasova G.C.

Bakı Dövlət Universiteti

henifeqasimova20@gmail.com

Peptidlər amin turşu qalıqları ardıcılığından ibarətdir. Onlar canlı orqanizmlərin toxuma və hüceyrələrində gedən bir çox proseslərin tənzimlənməsində mühüm rol oynayır. Bu mürəkkəb molekullar hüceyrələri bir çox zərərli amillərdən qoruyur. Amin turşularından ibarət olan peptidlər canlı orqanizmlərin immun sistemini zərərli xarici amillərdən qoruyur. İnsan orqanizminin toxuma və hüceyrələrinin sağlam olması üçün bir çox peptidlərin olması əhəmiyyət kəsb edir. Verilmiş isdə tədqiq edilmiş peptid dərman peptidi kimi tanınmışdır.

Dərman peptidi yeddi amin turşu ardıcılığından ibarətdir. Molekulun fəza quruluşunun öyrənilməsi ilk növbədə fraqmentlərlə tədqiq edilmişdir. Heptapeptid molekulun dayanıqlı konformasiyalarını tədqiq etmək üçün əvvəlcə dipeptid, daha sonra isə tripeptid His-Ala-İle molekulunun fəza quruluşu öyrənilmişdir.

Tripeptid His-Ala-İle molekulunun fəza quruluşunu öyrənərkən 159 konformasiya təyin edilmişdir. Hesablamalar göstərmişdir ki, bir çox konformasiyalar sterik cəhətdən əlverişli olmamışdır. Təyin edilmiş formalara uyğun dörd şeyp tədqiq edilmişdir. Heptapeptid molekulun bu üç amin turşu qalıqları ardıcılığı üçün əsas zəncirin iki əsas R və B formaları və həmçinin fe, ee, ef, ff şeyplərinə uyğun konformasiyaları daha əlverişli olmuşdur. [1]

Tripeptid fraqmentin əsas və yan zəncirinin ikiüzlü bucaqları müəyyən ardıcılıqla təyin edilmişdir. Əsas zəncirin və yan zəncirin ikiüzlü bucaqları R, B, L və P formaları ilə xarakterizə olunur. R, B, L, P formaları peptid molekulunun əsas zəncirinin həndəsi parametrlərini xarakterizə edir. Eyni zamanda

təyin edilmiş formalar molekulu təşkil edən atomlar arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvələrini xarakterizə edir. Tripeptid fraqmentin dayanıqlı quruluşlarının tədqiqi şeyplərə uyğun aparılır. Müəyyən olunmuşdur ki, əsas zəncirin eyni bir şeypinə uyğun formaları arasında onların yan zəncirlərinin P və L formalarının qarşılıqlı təsir enerjisi, eyni zamanda R və B formalarının enerjisindən çoxdur.

Heptapeptid molekulun tripeptid fraqmentinin fəza quruluşunu tədqiq edərkən əsas zəncirin yalnız R və B formaları nəzərə alınmışdır. Beləliklə, His-Ala-İle tripeptid molekulunun əsas zəncirinin 159 konformasiyası müəyyən edilmişdir.

Tripeptid fraqment üçün hesablanmış konformasiyalardan 0-3 kal/mol enerji intervalına yalnız 15 konformasiya düşmüşdür.

Cədvəl 1

Nö	Formalar	Şeyplər	Ümumi enerji	Nisbi enerji (kal/mol)
1	R ₁ BB ₁	fe	-4.79	2.42
2	R ₂ BB ₁	fe	-4.88	2.33
3	B ₂ BB ₂	ee	-6.02	1.19
4	R ₂ RB ₂	ff	-5.97	1.24
5	R ₃ RB ₃	ff	-6.00	1.21
6	B ₁ RB ₁	ef	-7.21	0.0
7	R ₃ BB ₂	fe	-4.49	2.72
8	R ₃ BB ₁	fe	-4.53	2.68
9	B ₃ BB ₃	ee	-6.67	0.54
10	R ₂ RB ₁	ff	-6.06	1.15
11	R ₁ RB ₂	ff	-6.09	1.12
12	B ₃ RB ₂	ef	-6.81	1.52
13	B ₁ BB ₃	ee	-5.85	1.36
14	R ₂ RB ₃	ff	-5.96	1.25
15	R ₃ RB ₁	ff	-6.10	1.11

Ədəbiyyat:

1. Аббасова Г.Д., Алиева И.Н., Омарова А.И., Моделирование пространственной структуры и конформационные свойства пептида Т7 // "Fizikanın müasir problemləri" V Respublika Elmi Konfransı, 16-17 dekabr, 2011, s.175-177.