

KAZOKSİN MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞU

¹Ağayeva L.N., ²İsmayılova L.İ., ²Əhmədov N.A.

¹Bakı Dövlət Universiteti, Fizika fakültəsi

*²Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri Elmi Tədqiqat İnstitutu
leylanamig@mail.ru*

İnfeksiyanın qarşısının alınmasında südün faydalı olduğu min illər öncə məlum olmuşdur. Süd məməlilər üçün xarakterik qidadır və insanlar üçün xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Göstərilmişdir ki, süd zülal fermentlərinin opioid reseptor liqandları kimi özlərini aparır. Kazoksinslər və laktoferroksinslər antaqonist xüsusiyyətlərə malikdir; digər peptidlər opioid reseptor aqonistləri kimi özlərini aparırlar. Bu molekulların yerinə yetirdikləri funksiyaları başa düşmək, onlara məqsədyönlü təsir etmək, müəyyən funksiyalarını yerinə yetirən analoqlarını sintez etmək üçün onların fəza quruluşlarını bilmək lazımdır. Bizim tədqiqat işlərimiz qida maddələrindən alınan molekulların fəza quruluşlarını öyrənməyə həsr olunmuşdur. Məlum olduğu kimi aşağıdakı kazoksins molekulları mövcuddur[1].

Tyr1-Pro2-Ser3-Tyr4-Gly5-Leu6-Asn7-NH₂ kazoksins A, Tyr1-Pro2-Tyr3-Tyr4-NH₂ kazoksins B, Tyr1-Val2-Pro3-Phe4-Pro5-Pro6-Tyr7-OH kazoksins D, Tyr1-Ile2-Pro3-Ile4-Gln5-Tyr6-Val7-Leu8-Ser9-Arg10-OH kazoksins C. Kazoksins A, B, D molekullarının fəza quruluşları tədqiq olmuşdur. Bu tədqiqat işimiz kazoksins C molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsinə həsr olunmuşdur. Molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Dekapeptid kazoksins C molekulunun fəza quruluşu onu fraqmentlərə ayırmaqla öyrənilmişdir. İlk mərhələdə üç tetrapeptid Tyr1-Ile2-Pro3-Ile4, Ile4-Gln5-Tyr6-Val7 və Val7-Leu8-Ser9-Arg10 fraqmentlərinin konformasiya imkanları uyğun aminturşu qalıqlarının aşağı-enerjili konformasiyaları əsasında hesablanmışdır. İkinci mərhələdə tetrapeptid Tyr1-Ile4 və Ile4-Val7 fraqmentlərinin aşağıenerjili quruluşları əsasında heptapeptid Tyr1-Ile2-Pro3-Ile4-Gln5-Tyr6-Val7 faqmentinin fəza quruluşu hesablanmışdır. Üçüncü mərhələdə N-tərəf heptapeptid Tyr1-Val7 faqmentinin və C-tərəf tetrapeptid Val7-Arg10 faqmentlərinin optimal konformasiyaları əsasında bütün dekaeptid molekulun fəza quruluşu tədqiq edilmişdir. Kazoksins D molekulunun fəza quruluşunun hesablanması göstərdi ki, şeyplərin, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə kəskin differensiasiya gedir. 0 – 20 kC/mol enerji intervalına dörd şeypə mənsub, əsas zəncirin dörd formasının konformasiyaları düşür. Əsas zəncirin hər bir formasının ən aşağıenerjili konformasiyası, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də göstərilmişdir. Cədvəldən göründüyü kimi

molekulun N-tərəf pentapeptid fraqmenti cəmi iki quruluşla təmsil olunmuş, C-tərəf pentapeptid fraqmentinin isə dörd fəza quruluşu stabil olmuşdur.

Cədvəl 1

Kazoksın C molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları

№	Şeyp	K o n f o r m a s i y a	Enerji			U _{nis}
			U _{qv}	U _{el}	U _{tor}	
1	eefffeefe	B ₂₁₁ B ₁₂₂₂ RR ₂₂₂₂ R ₂₁₃ B ₃₁₁ B ₃₂₂ R ₂₁₃ B ₂₂ B ₃₁₂₂	-201.6	24. 4	34. 0	0
2	eeffeeefe	B ₂₁₁ B ₁₂₂₂ RR ₂₂₂₂ B ₂₁₃ B ₃₁₁ B ₃₂₂ R ₂₁₂₂ B ₂₂ B ₃₁₂₂	-196.1	24. 8	30. 7	2.1
3	eeeeeeeee	B ₂₁₁ B ₁₂₂₂ BB ₃₂₂₂ B ₂₁₃ B ₃₁₁ B ₃₂₂ B ₁₂₂₂ B ₃₂ B ₁₂₂₂	-176.0	18. 9	30. 7	16. 4
4	eeeeffef	B ₂₁₁ B ₂₂₂₂ BB ₁₂₂₂ R ₂₁₃ R ₂₁₁ R ₃₂₂ B ₂₁₂₂ R ₂₂ R ₃₂₂₂	-198.2	25. 2	31. 1	1.3

Kazoksın C molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, molekul elə fəza quruluşları yığımına malik olur ki, o müxtəlif bioloji funksiyaları yerinə yetirə bilər və müxtəlif reseptor molekulaları ilə əlaqəyə girə bilər. Kazoksın C molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsindən alınan nəticələr digər kazoksın molekulalarının fəza quruluşlarının tədqiqində, təbii molekulun yalnız müəyyən funksiyalarını yerinə yetirə bilən süni analoqlarını sintez etmək üçün istifadə oluna bilər.

Ədəbiyyat:

1. Чеснокова Е.А., Сарычева Н.Ю., Дубынин В.А., Каменский А.А. Опиоидные пептиды, получаемые с пищей и их влияние на нервную систему. Успехи физиологических наук, 2015, т. 46, №1, с. 22-46.