

UOT 577.3

**β- KAZOMORFİN-5 MOLEKULUNUN
NƏZƏRİ KONFORMASIYA ANALİZİ**

**L.N.AGAYEVA, R.M.ABBASLI,
L.İ.İSMAYİLOVA, L.S.HACIYEVA, N.A.ƏHMƏDOV**
Bakı Dövlət Universiteti
leylanamig@mail.ru

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH₂ β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşu tədqiq olunmuşdur. β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. β-kazomorfin-5 molekulunun stabil konformasiyaları yığımları, onların ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri, onları stabilləşdirən aminturşu qalıqları arasındakı və daxili qarşılıqlı təsir enerjiləri müəyyən edilmişdir. Göstərilmişdir ki, bu molekulun fəza quruluşu 0 – 8 kkal/mol enerji intervalına düşən əsas zəncirin on altı forması ilə təmsil edilir.

Açar sözlər: ekzorfin, kazomorfin, opioid, fəza quruluşu, konformasiya

Qida maddələrindən alınmış bir sıra ekzogen peptidləri opioidəbənzər xassələrə malikdir. İlk dəfə elmə məlum olan ekzorfinlər α-kazeindən və buğda qlütenindən alınmışdır və müəyyən təsirləri öyrənilmişdir. Qida maddələrinin peptid komponentlərinin opioid aktivliyinə malik olmasının kəşfi belə fərziyyə ilə irəli sürməyə əsas verdi ki, bəzi yeməklər mərkəzi əsəb sisteminə opiat dərmanlar kimi təsir göstərməyə qadirdir. Bəzi tədqiqatçılar fərz edirlər ki, insanlar tərəfindən süd və buğda məhsullarının çox istifadə edilməsi onların tərkibində ekzorfinlərin olması nəticəsində olmuşdur. Endogen opioid peptidlərinin və ekzorfinlərin aminturşu qalıqları ardıcılıqlarının müqayisəsi göstərir ki, ekzorfin molekulunun N-tərəf aminturşu qalıqları daha rəngarəngdir. Bu onu göstərir ki, ekzorfinlər opiat reseptorlarının ixtisaslaşdırılmış liqandları deyil və onlar bəzi hallarda müxtəlif mediator və hormonlarla müxtəlif vəziyyətlərdə qarşılıqlı təsirlərdə ola bilərlər. Ekzorfinlərin N- tərəfində ən çox rast gəlinən Tyr-Pro ardıcılığıdır. Endogen opioid peptidlərinin N-tərəfində ən çox rast gəlinən Tyr-Gly-Gly-Phe ardıcılığıdır. Prolin aminturşu qalığının olması molekulu parçalanmaya qarşı daha davamlı edir. Heyvan mənşəli ekzorfinlər

arasında ən çox tədqiq olunanı süd zülalının törəmələridir. Ən çox öyrənilənləri inək südünün β -kazeininin hidrolizindən alınan β -kazomorfin-4, -5, -6, -7 –dir. [1-4].

Opioid peptidləri sinfinə aid olan enkefalinlərin, endorfinlərin, endomorfinlərin, dinorfinlərin, neoendorfinlərin quruluş-funksiya əlaqələrini tədqiq etmişik, indi isə ekzorfinlər sinfinə daxil olan molekulların quruluş-funksiya əlaqələri tədqiq olunur. Bu tədqiqat işi də əvvəlki tədqiqat işlərimizin davamıdır [5-10].

Hesablama metodu

Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH₂ β -kazomorfin-5 molekulu beş amin-turşu qalığından, 81 atomdan və 18 ikiüzlü fırlanma bucağından ibarətdir. β -kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Momani və Şeraqanın verdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Molekulun konformasiya imkanları su mühitində öyrənilmişdir. Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Torsion qarşılıqlı təsir enerjisini hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqlarının qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. İkiüzlü fırlanma bucaqlarının işarələri və qiymətləri beynəlxalq nomenklaturaya uyğundur [11].

Nəzəri konformasiya analizi üsulunda hesablamaların nəticələrini təhlil etmək üçün hər bir aminturşu qalığının konformasiya halını xarakterizə etmək üçün $X^{n_{ij}}$ işarəsindən istifadə edilir, burada X-aminturşu qalığının əsas zəncirinin formalarını (R,B,L,P), n-ardıcılıqda aminturşu qalığının neçənci yerdə durduğunu, $ij=11,12,13,21$ və s. simvolları aminturşu qalığının yan zəncirinin vəziyyətini (χ_1, χ_2, χ_3) xarakterizə edir. 1-indeksi ikiüzlü fırlanma bucağının qiymətinin $0^\circ-120^\circ$ intervalında, 2-indeksi $120^\circ- -120^\circ$ intervalında, 3-indeksi $-120^\circ-0^\circ$ intervalında dəyişdiyini göstərir. Aminturşu qalığının əsas zəncirinin R-oblastında ikiüzlü fırlanma bucaqları φ və ψ -nin qiymətləri $-180^\circ-0^\circ$ intervalında; B-oblastında φ -nin qiyməti $-180^\circ-0^\circ$ intervalında, ψ -nin qiyməti $0^\circ-180^\circ$ intervalında; L-oblastında φ və ψ -nin qiymətləri $0^\circ-180^\circ$ intervalında; P-oblastında φ -nin qiyməti $0^\circ-180^\circ$ intervalında, ψ -nin qiyməti $-180^\circ-0^\circ$ intervalında dəyişir. Əsas zəncirin forması anlayışı aminturşu qalıqlarının əsas zəncirinin ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətlərinin R,B,L,P oblastlarına düşdüyünü müəyyən edir.

Molekulun əsas zənciri e və f şəypə adlanan simvollarla da xarakterizə olunur ki, bunlar da uyğun olaraq $C^{\alpha}_i-C^{\alpha}_{i+1}-C^{\alpha}_{i+2}-C^{\alpha}_{i+3}$ virtual rabitələrinin açılmış və bükülmüş konfigurasiyasına uyğun gəlir. f-şeypini dipeptid fraqmentin

R-R, R-B, B-L, L-L, B-P, L-P, P-R, R-B formaları, e-şeypini isə B-B, B-R, L-B, L-P, R-L, R-P, P-L, P-P formaları əmələ gətirir.

Hesablamların nəticələri və onların müzakirəsi

Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH₂ β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən metilamid-N-asetil-L-tirozin və β-kazomorfin-4 molekullarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında tədqiq olunmuşdur. Birinci mərhələdə Pro1-Phe2-Pro3-Gly4-NH₂ β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən uyğun aminturşu qalıqlarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında hesablanmışdır. Məlumdur ki, molekulun aminturşu qalıqları ardıcılığında qlisindən başqa digər aminturşu qalıqları prolin aminturşu qalığından əvvəl gəldikdə onlar üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyaları yüksəkenerjili olur. Ona görə də β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşunu hesablamaq üçün başlanğıc variantlar seçildikdə Phe2 üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyalarına baxılmamışdır. Bu səbəbdən də molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün başlanğıc variantlar peptid zəncirin eee, eef, fee və fef şeyplərinin əsas zəncirlərinin 16 formasının konformasiyaları əsasında formalaşmışdır. β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə diferensiasiya gedir. Hesablanmış konformasiyalar arasından əsas zəncirin hər bir formasının ən aşağıenerjili konformasiyası seçilmiş, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1

β-kazomorfin-4 molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri

Nö	Şeyp	Konformasiya	U _{qv}	U _{el}	U _{tor}	U _{üm}	U _{nis}
1	fef	R B ₃ R R	-10.3	-2.7	1.0	-12.0	0
2		R B ₂ B L	-8.9	-3.0	1.5	-10.3	1.7
3		B L ₃ R R	-9.2	-2.6	1.7	-10.1	1.9
4		B L ₂ B L	-7.6	-2.6	1.9	-8.3	3.7
5	fee	R B ₁ R L	-9.4	-2.8	0.8	-11.3	0.7
6		R B ₁ B B	-6.7	-3.1	0.9	-8.9	3.1
7		B L ₃ R L	-7.6	-2.6	1.5	-8.7	3.3
8		B L ₃ B B	-5.4	-3.0	1.4	-7.0	5.0
9	eef	B B ₃ R R	-9.0	-2.8	1.2	-10.6	1.4
10		R L ₃ R R	-10.1	-2.4	2.1	-10.3	1.7
11		B B ₂ B L	-8.5	-2.9	1.5	-9.9	2.1
12		R L ₂ B L	-8.2	-2.5	1.7	-9.0	3.0
13	eee	B B ₁ R L	-7.5	-2.8	0.9	-9.4	2.6
14		R L ₂ R L	-8.1	-2.4	1.5	-9.0	3.0
15		B B ₁ B B	-5.4	-3.2	1.2	-7.4	4.6
16		R L ₃ B B	-6.4	-2.8	1.8	-7.3	4.7

Cədvəl 1-dən göründüyü kimi, qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin ümumi enerjiyə verdiyi pay (-10.3) – (-5.4) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (-3.2) – (2.4) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (0.8) - (2.1) kkal/mol intervalında olmuşdur. Cədvəl 1-də göstərilən konformasiyaların nisbi enerjiləri isə 0 - 5.0 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Bu konformasiyaların hamısı və Tyr1-in aşağıenerjili konformasiyaları β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu hesablamaq üçün başlanğıc variantlar kimi seçilmişdir. Ona görə də pentapeptid molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün ilk yaxınlaşmada bir neçə yüz konformasiya hesablanmışdır.

β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunun hesablanması göstərdi ki, şeyplərin, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə diferensiasiya gedir. 0 – 10 kkal/mol enerji intervalına dörd şeypə mənsub, əsas zəncirin on altı 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 2-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2

β-kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri

No	Şeyp	Konformasiya	U_{qv}	U_{el}	U_{tor}	$U_{üm}$	U_{nis}
1	efee	B ₁ R B ₁ R L	-16.4	-2.2	1.8	-16.8	0
2		B ₃ R B ₁ B B	-16.5	-2.7	3.4	-15.8	1.0
3		B ₂ B L ₃ R L	-13.4	-1.7	2.5	-12.6	4.2
4		B ₁ B L ₃ B B	-10.7	-2.3	2.7	-10.4	6.4
5	eeef	B ₂ B B ₃ R R	-16.4	-1.9	3.1	-15.2	1.6
6		B ₂ B B ₂ B L	-15.9	-2.2	3.4	-14.8	2.0
7		B ₂ R L ₂ B L	-13.7	-1.8	3.0	-12.5	4.3
8		B ₃ R L ₃ R R	-13.0	-1.6	2.8	-11.9	4.9
9	efef	B ₃ R B ₁ B L	-15.5	-2.0	2.8	-14.7	2.1
10		B ₃ R B ₃ R R	-13.9	-2.4	2.2	-14.2	2.6
11		B ₁ B L ₃ R R	-13.7	-2.1	2.4	-13.4	3.4
12		B ₂ B L ₂ B L	-13.7	-1.7	2.7	-12.7	4.1
13	eeee	B ₂ B B ₁ R L	-14.6	-1.9	3.2	-13.3	3.5
14		B ₂ B B ₁ B B	-14.2	-2.5	3.8	-12.9	3.9
15		B ₂ R L ₂ R L	-11.7	-1.5	2.6	-10.6	6.2
16		B ₃ R L ₃ B B	-9.6	-2.1	2.5	-9.2	7.6

Cədvəl 2-dən göründüyü kimi, qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin ümumi enerjiyə verdiyi pay (-16.5) – (-9.6) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (-2.7) – (-1.5) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (1.8) - (3.8) kkal/mol intervalında olmuşdur. Cədvəl 2-də göstərilən konformasiyaların nisbi enerjiləri isə 0 - 8.0 kkal/mol enerji intervalında dəyişir.

β -kazomorfin-5 molekulunun hər bir şəypinin ən aşağıenerjili konformasiyalarında aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri cədvəl 3-də, onların həndəsi parametrləri isə cədvəl 4-də göstərilmişdir. β -kazomorfin-5 molekulunun ən stabil konformasiyası efee şəypinə mənsub B_1RB_1RL -dir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi bu konformasiya eyni zamanda qeyri-valent, elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinə görə əlverişlidir. Bu konformasiyada Tyr1 fəzada elə vəziyyətdə yerləşir ki, özündən sonra gələn Pro2, Phe3 və Pro4 ilə əlverişli qarşılıqlı təsir yaradır. Bu qarşılıqlı təsirlər ümumi enerjiyə (-11.6) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3). Konformasiyanın stabilləşməsinə Pro2–Phe3 qarşılıqlı təsiri (-2.2) kkal/mol qədər, Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsiri isə (-5.5) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3).

efee şəypinin və molekulun ikinci aşağıenerjili konformasiyası B_3RB_1BB -dir. Bu konformasiya qeyri-valent və elektrostatik qarşılıqlı təsirlərə görə qlobal konformasiyadan daha əlverişlidir və elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinə görə ən əlverişlidir. Yalnız torsion qarşılıqlı təsir enerjisinə görə qlobal konformasiyaya uduzur (cədvəl 2). efee şəypinin $BBLRL$ və $BBLBB$ formalarının konformasiyalarının nisbi enerjiləri 4.2 kkal/mol-dan böyükdür.

eeef şəypinin cədvəl 2-də göstərilən konformasiyalarının nisbi enerjiləri 1.6–4.9 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 1.6 kkal/mol olan B_2RB_3RR -dir. Bu konformasiyaya qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi (-16.4) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi (-1.9) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi 3.1 kkal/mol qədər pay verir. Bu konformasiyada da Tyr1 fəzada elə vəziyyətdə yerləşir ki, özündən sonra gələn Pro2, Phe3 və Pro4 ilə əlverişli qarşılıqlı təsir yaradır, onlarla qarşılıqlı təsir enerjisi ümumi enerjiyə (-12.0) kkal/mol qədər pay verir. Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə ümumi enerjiyə (-5.4) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3). eeef şəypinin sonrakı aşağıenerjili konformasiyası B_2BB_2BL -dir, onun nisbi enerjisi özündən əvvəlki konformasiyanın nisbi enerjisindən 0,4 kkal/mol qədər çoxdur. Qeyri-valent və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri paya görə bu konformasiya əvvəlki konformasiyadan geri qalır. eeef şəypinin B_2RL_2BL konformasiyasının və B_3RL_3RR konformasiyasının nisbi enerjiləri uyğun olaraq 4.3 kkal/mol və 4.9 kkal/mol-dur (cədvəl 2).

efef şəypinin aşağıenerjili konformasiyalarının nisbi enerjiləri 2.1 – 4.1 kkal/mol intervalında dəyişir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 2.1 kkal/mol olan B_3RB_1BL -dir. Bu konformasiya qlobal konformasiyaya qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjilərinə görə 0.9 kkal/mol qədər, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinə görə 0.2 kkal/mol qədər, torsion qarşılıqlı enerjilərinə görə 1.0 kkal/mol qədər uduzur (cədvəl 2). Bu konformasiyada Tyr1-in özündən sonra gələn dörd aminturşu qalığı ilə qarşılıqlı təsir enerjisi ümumi enerjiyə (-7.7) kkal/mol qədər pay verir, Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə ümumi enerjiyə (-8.4) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3).

Cədvəl 3

β -kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili $B_1 R B_1 R L$ ($U_{nis}=0$ kkal/mol, 1-ci sətr), $B_2 B B_3 R R$ ($U_{nis}=1.6$ kkal/mol, 2-ci sətr), $B_3 R B_1 B L$ ($U_{nis}=2.1$ kkal/mol, 3-cü sətr), $B_2 B B_1 R L$ ($U_{nis}=3.5$ kkal/mol, 4-cü sətr) konformasiyalarında aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri

Tyr1	Pro2	Phe3	Pro4	Gly5	
3.1	-4.4	-2.9	-4.3	-0.2	Tyr1
2.4	-5.6	-5.0	-1.4	0	
2.2	-4.2	-2.8	-0.3	-1.4	
2.2	-5.6	-3.9	-0.8	0	
	0.3	-2.2	-0.4	0	Pro2
	0.3	-1.2	-0.6	0	
	0.3	-1.7	-0.8	-0.1	
	0.3	-0.3	-0.4	0	
		-0.3	-3.5	-2.0	Phe3
		0	-3.1	-2.3	
		0.1	-5.0	-3.4	
		-0.2	-3.7	-2.3	
			0.3	-1.3	Pro4
			0.3	-1.2	
			0.6	-0.3	
			0.3	-1.3	
				-0.8	Gly5
				-0.8	
				-0.7	
				-0.8	

Tam açılmış eeee şeypinin cədvəl 2-də göstərilən konformasiyalarının nisbi enerjiləri 3.5 – 7.6 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Göründüyü kimi, eeee şeypinin konformasiyaları yüksəkenerjilidir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 3.5 kkal/mol olan B_2BB_1RL -dir. Konformasiyanın stabilləşməsinə Tyr1-in Pro2-Phe3-lə qarşılıqlı təsir enerjisi (-9.5) kkal/mol qədər, Phe3-ün Pro4-Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə (-6.0) kkal/mol qədər ümumi enerjiyə pay verir (cədvəl 3).

Cədvəl 4

β -kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili konformasiyalarının həndəsi parametrləri

Amin turşusu	$B_1 R B_1 R L$	$B_2 B B_3 R R$	$B_3 R B_1 B L$	$B_2 B B_1 R L$
Tyr1	-87 146 171 55 78 0	-72 117 172 167 74 0	-66 151 172 -70 111 0	-63 -114 168 167 76 0
Pro2	-60 -63 177	-60 127 -172	-60 -51 174	-60 119 -174
Phe3	-124 144 180 61 88	-98 145 176 -59 104	-86 134 178 180 91	-123 147 180 69 96
Pro4	-60 -57 180	-60 -55 177	-60 -100 -177	-60 -60 180
Gly5	69 63 180	-76 -58 179	73 54 179	75 59 180

Qeyd: ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri $\phi, \psi, \omega, \chi_1, \chi_2, \dots$ ardıcılığı ilə verilmişdir.

β -kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, molekul elə fəza quruluşları yığımına malik olur ki, o müxtəlif bioloji funksiyaları yerinə yetirə bilər və müxtəlif reseptor molekulları ilə əlaqəyə girə bilər. β -kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsindən alınan nəticələr β -kazomorfin-6,-7 molekullarının fəza quruluşlarının tədqiqində istifadə oluna bilər.

ƏDƏBİYYAT

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.
2. Дубынин В.А. Экзорфины: возможное биологическое и клиническое значение. Психиатрия. 2010. Т.45. №3. С. 65-73.
3. Дубынин В.А., Ивлева Ю.А., Каменский А.А. Нейротропная активность опиоидных пептидов пищевого происхождения β -казоморфинов//Успехи физиол. наук. 2004. Т.35. №1, С. 83-101.
4. Дубынин В.А., Каменский А.А. Бета-казоморфины и их роль в регуляции поведения. М.: КМК, 2010. 304 с.
5. Ахмедов Н.А., Годжаев Н.М., Сулейманова Е.В., Попов Е.М. Структурная организация молекул [Met] энкефалина и эндорфинов. Биоорганическая химия, 1990, т. 16, с. 649-667.
6. Akhmedov N.A., Agayeva L.N., Ismailova L.I., Godjaev N.M. The spatial structure of the cardio active peptides. Current Topics in Peptide and Protein Research. 2010, v. 11, pp. 87-93.
7. Гаджиева Ш.Н., Ахмедов Н.А., Масимов Э.А., Годжаев Н.М. Пространственная структура молекулы Thr-Pro-Ala-Glu-Asp-Phe-Met-Arg-Phe-NH₂, Биофизика, 2013, Том 58, вып. 4, с. 587-590.
8. Akhmedov N.A., Ismailova L.I., Abbasli R.M. et al.Spatial Structure of Octarphin molecule. IOSR.J.Applied Physics (IOSR-JAP). 2016, 8, 66-70.
9. Hasanov E.M., Akhmedov N.A. Spatial Structure of Peptide BAM-20P. International Journal of Innovative Science and Research Technology ISSN No:-2456-2165, 2018, v. 3, pp. 72-76.
10. Akhmedov N.A., Abbasli R.M., Agayeva L.N., Ismailova L.I. Three-dimensional structure of exorpin B5 molecule. Conference proceedings Modern Trends In Physics. 2019, 201-204.
11. IUPAC-IUB. Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific, Oxford, 1993.

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ β -КАЗОМОРФИНА-5

Л.Н.АГАЕВА, Р.М.АББАСЛЫ, Л.И.ИСМАИЛОВА,
Л.С.ГАДЖИЕВА, Н.А.АХМЕДОВ

РЕЗЮМЕ

Методом теоретического конформационного анализа исследована пространственная структура молекулы β -казоморфина-5 (Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH₂). Потенциальная функция системы выбрана в виде суммы невалентных, электростатических и

торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Найдены низкоэнергетические конформации молекулы, значения двугранных углов основных и боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в состав молекулы, оценена энергия внутри- и межостаточных взаимодействий. Было показано, что трехмерная структура этой молекулы может быть представлена 16 низкоэнергетическими формами основной цепи, попадающими в энергетический интервал 0-8,0 ккал/моль.

Ключевые слова: экзорфин, казоморфин, опиоид, структура, конформация

SPATIAL STRUCTURE OF β -CASOMORPHIN-5 MOLECULE

L.N.AGAYEVA, R.M.ABBASLI, L.I.ISMAILOVA, L.S.HAJIYEVA, N.A.AKHMEDOV

SUMMARY

By the method of the theoretical conformational analysis the conformational capabilities of the β -casomorphin-5 (Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH₂) molecule were studied. The potential function of the system is chosen as the sum of non-valent, electrostatic and torsion interactions and the energy of hydrogen bonds. Low-energy conformations of the β -casomorphin-5 molecule, the values of the dihedral angles of the main and side chains of amino acid residues that make up the molecules are founded; the energy of intra- and inter-residual interactions is estimated. It is shown that the spatial structure of the casomorphin-5 molecule can be represented by 16 conformations.

Key words: exorphin, casomorphin, opioid, structure, conformation