

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ
ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР АНАЛОГОВ С-КОНЦЕВОГО
ГЕПТАПЕПТИДА МОЛЕКУЛЫ ФИЗАЛАЕМИНА**

Г.А. Агаева

Институт физических проблем, Бакинский государственный университет

Методом теоретического конформационного анализа было исследовано пространственное строение аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина, обладающих способностью стимулировать слюноотделение. Молекула физалаемина, впервые выделенная из кожи амфибии *Physalaemin fuscumaculatus*, содержит 11 остатков с аминокислотной последовательностью: pGlu1-Ala2-Asp3-Pro4-Asn5-Lys6-Phe7-Tyr8-Gly9-Leu10-Met11NH₂ и по многим функциональным признакам и гомологичной первичной структуре относится к группе тахикининовых пептидов, характеризующихся одинаковой С-концевой последовательностью Phe-Xaa-Gly-Leu-Met NH₂. На основе фрагментарного анализа были определены стабильные структуры 18 аналогов гептапептидов физалаемина с точечными заменами остатков в позициях 5 и 6. Сравнительный конформационный анализ показал что для аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина энергетически наиболее предпочтительными оказались конформации, характеризующиеся наличием альфа-спирального сегмента на С-конце молекулы. В результате расчетов были определены энергетически предпочтительные области величин двугранных углов и взаимное расположение остатков в низкоэнергетических конформациях аналогов физалаемина. Конформационный анализ последовательно модифицированных аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина выявил значительную схожесть результатов по мере увеличения их биологической активности аналогов. Конформационные возможности аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина выявили структурообразующую роль каждого замещенного остатка. На основе полученных данных были обсуждены конформационно-функциональные взаимосвязи молекулы физалаемина и его аналогов.