

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

LVV-ГЕМОРФИНА-7

Г.А. Ахвердиева, Н.М. Годжаев, А.М. Набиев

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет

Теоретическими методами исследовано пространственное строение опиоидного пептида LVV-геморфина-7. На первом этапе в рамках механической модели изучены конформационные профили данной молекулы. Установлено, что энергетически предпочтительными для исследуемого пептида являются структуры, напоминающие петлю и характеризующиеся поворотом цепи на центральном тетрапептидном участке Tyr⁴-Thr⁷, аминокислотная последовательность которого соответствует геморфину-4. В таких конформациях остатки Tyr и Thr располагаясь в цис-позиции относительно Pro, максимально сближены в пространстве, при этом плоскости их колец составляют угол 90° или 0°. Проведенные на последующем этапе квантовохимические расчеты показали, что именно указанные структуры обладают наименьшим дипольным моментом, что объясняется равномерностью распределения в них отрицательного и положительного зарядов. В результате изучения молекулярной динамики во временном интервале 10 нс были оценены вероятные состояния пространственной структуры пептида в области локальных минимумов. Выявлено, что за время симуляции молекулярного движения C-концевой участок Gln-Arg-Phe молекулы пространственно сближается с его N-концевой частью, в результате чего межатомные расстояния аминокислотных остатков Val² vs Phe¹⁰ укорачиваются на 2Å, центральная же часть пептида демонстрирует конформационную жесткость. За время симуляции расстояние между C^α атомами остатков Tyr⁴ и Thr⁷ остается неизменной, небольшое сближение происходит лишь между атомами остатков Tyr⁴ и Trp⁶, в результате чего пептидная молекула приобретает еще более компактную форму. На основе полученных данных проведено компьютерное моделирование трехмерной структуры LVV-геморфина-7.