

СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ МИОМОДУЛИНОВ

Н.М. Годжаев, Н.А. Ахмедов, Р.М. Аббаслы, Л.И. Исмаилова

*Бакинский Государственный Университет,
Институт физических проблем, г.Баку, Азербайджан*

Семейство пептидных молекул миомодулина, найденных в нейронах моллюска *Aplysia*, относится к нейропептидам. Известно, что миомодулины оказывают модулирующее действие на возбудимость нейронов и мембранные токи. С помощью этих нейротрансмиттеров можно представить электрофизиологические свойства сенсорных нейронов. Целью данной работы является исследование пространственных структур молекул миомодулинов А, D, F:

Pro1-Met2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ (миомодулин А)

Gly1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ (миомодулин D)

Ser1-Leu2-Asn3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ (миомодулин F).

Исследование пространственной структуры молекул миомодулинов проводилось с помощью метода теоретического конформационного анализа. Расчет выполнялся в рамках механической модели молекул с учетом невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Пространственное строение гептапептидных молекул миомодулинов А, D и F исследовалось фрагментарно. На первом этапе изучены конформационные возможности N-концевых тетрапептидных фрагментов и C-концевого тетрапептидного участка. Затем на основе полученных результатов тетрапептидов была рассчитана пространственная структура всех молекул. Расчет показал, что пространственная структура молекул миомодулинов А, D и F может быть представлена десятью стабильными формами основной цепи. Молекулы миомодулинов А и D имеют одинаковую низкоэнергетическую структуру, а миомодулин F имеет отличную от них глобальную конформацию. Полученные результаты могут быть использованы при выяснении вопросов биологической активности, для связи функции этих молекул с их структурой и для целенаправленного синтеза аналогов, моделирующих вполне определенные конформации природных молекул.