

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ИММУНОАКТИВНЫХ ПЕПТИДОВ

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

*Бакинский Государственный Университет,
Институт Физических Проблем, Баку, Азербайджан*

В настоящее время большое внимание привлекают короткие пептиды, включающие остатки глицина и пролина. Глипролины влияют на систему свертывания крови, модулируют работу иммунной системы, обладают противовоспалительным действием. Механизмы действия глипролинов мало изучены, поэтому актуальным является исследование их структурно-функциональных свойств. Целью данного исследования является изучение пространственной структуры и конформационных возможностей трипептидов Pro-Gly-Pro, N-ацетил-Pro-Gly-Pro, гексапептида (Pro-Gly-Pro)₂ и гептапептида Met-Glu-His-Phe-Pro-Gly-Pro. Расчет выполнялся в рамках механической модели молекул с учётом невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий и энергии водородных связей.

Для трипептида (41 атом и 8 двугранных углов), гексапептида (69 атомов и 16 углов), гептапептида (107 атомов и 29 двугранных углов) были найдены все возможные пространственные структуры. Получено, что низкоэнергетической конформацией для трипептида является RPR, которая имеет полусвернутый ход основной цепи. Добавление N-концевой ацетильной группы не меняет распределения конформаций в молекуле N-ацетил-Pro-Gly-Pro. Низкой энергией для гексапептида обладают конформации RPBRBR, RPBRPR, RLBRPR и RLBRBR, а для гептапептидной молекулы - BRRBRPR, BRRBRLR, BRRBBLB, BRRBBPR, RRRBRRR с полусвернутым концевым трипептидным фрагментом. В низкоэнергетических структурах гептапептидной молекулы была оценена конформационная подвижность боковых цепей аминокислотных остатков путем построения конформационных карт. Найдено, что необходимым для проявления защитного действия клетки является наличие C-концевой последовательности Gly-Pro в каждой из изученных молекул. Полученные результаты могут быть использованы для конструирования новых аналогов глипролинов.