

ARG-GLY-ASP TRIPEPTİD MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞUNUN TƏDQIQI

N. TOLA, N. QOCAYEV

Bakı Dövlət Universiteti

Qafqaz Universiteti

Bakı / AZƏRBAYCAN

XÜLASƏ

Məqalədə Arg-Gly-Asp tripeptid molekulunun konformasiya analizi aparılmışdır. Analiz nəticəsində molekulun fəza quruluşunu müəyyən edən həndəsi parametrlər və hər konformasiyaya uyğun gələn enerji hesablanmışdır.

Açar sözlər: Tripeptid, molekul, konformasiya analizi

THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF ARG-GLY-ASP TRIPEPTIDE MOLECULE

ABSTRACT

Conformational analysis of the tripeptide molecule Arg-Gly-Asp has been carried out in the article. In the result of analysis geometrical parameters of 3 dimensional space structures of the molecule and corresponding energies are calculated.

Key words: Tripeptide, molecule, conformational analysis.

1. Giriş

Son zamanlar nanotexnologyanın sürətlə inkişafı və onun elm və texnikanın müxtəlif sahələrində geniş tətbiq imkanları ilə əlaqədar olaraq bioloji təbiətli nanoobyektlərin tədqiqinə xüsusi maraq yaranmışdır. Bu həm də onunla əlaqədardır ki, nanotexnologyanın təməl ünsürlərindən biri olan bioloji nanoobyektlərin istifadəsi tibb sahəsində ağılasığmaz yeniliklər gətirə bilər. ABŞ Milli Onkologiya İnstitutu əməkdaşlarının fikrinə görə nanotexnologiya xərçəng xəstəliyini onun başlanğıc ərafəsində müalicə etmək imkanı yarada bilər. Burada önəmli olan odur ki, belə müalicə zərərverici yan effektlərin yaranmasına imkan vermir. Çünki bu məqsədlə yaradılması nəzərdə tutulan mexanizm insan orqanizmində mövcud olan bədən xassəli hüceyrələri

məqsədyönlü şəkildə tapma və müalicə üçün işləniləcək dərmanı yalnız belə hüceyrələrə daşıma imkanı yaratmalıdır. Belə üsulun tətbiqi yan zərərləri olan kimyəvi terapiya və radiasiyadan istifadə etmək zərurətini aradan qaldırır. Bu sadə misaldan göründüyü kimi bioloji aktiv nanomolekulların quruluş-funksiya əlaqələri tədqiqinin nanotexnologiya elminin inkişafı üçün geniş zəmin yaradacaqdır.

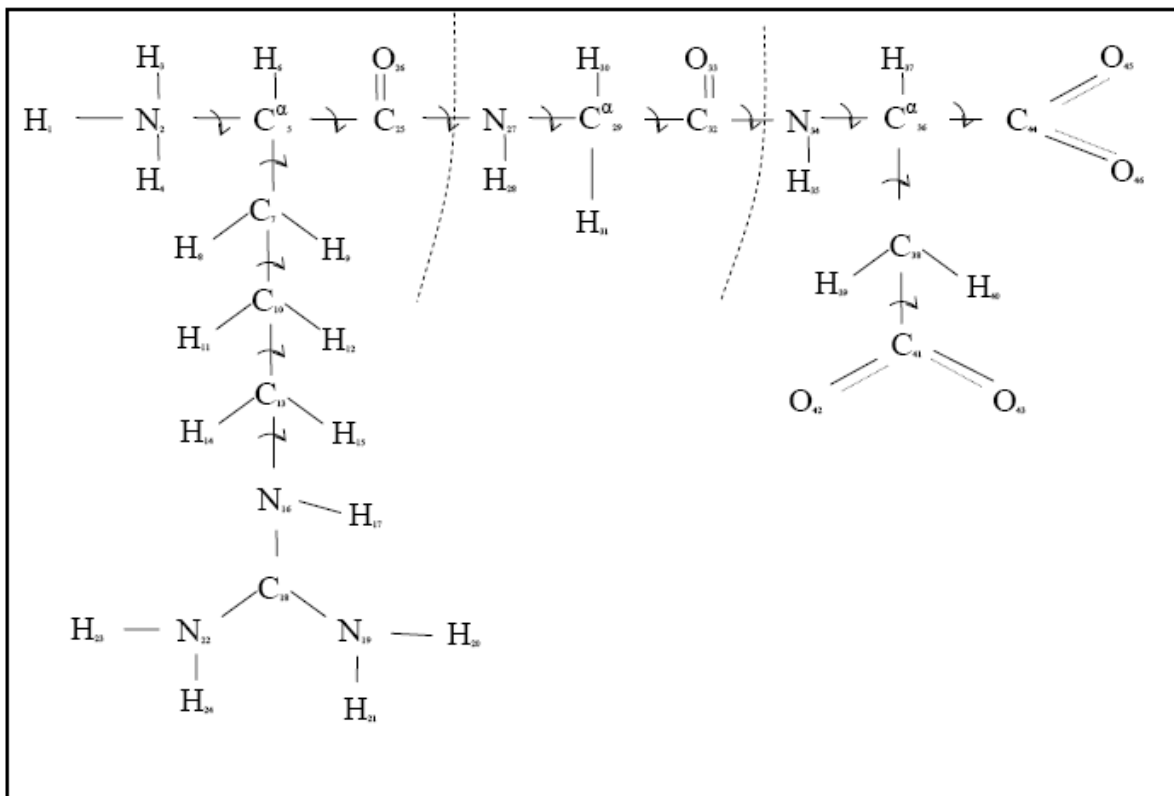
Molekulun quruluşu onu təşkil edən atomların bir-birinə nəzərən fəzada necə yerləşmələri ilə müəyyən olunur. Bioloji molekulara gəldikdə məsələ bir qədər mürəkkəbləşir. Bunun səbəbi, bioloji molekulaların birqat kimyəvi rabitələrlə bir-birinə birləşmiş çoxlu sayda atomlardan ibarət olmasıdır. Birqat kimyəvi rabitələr ətrafında fırlanmalar mümkün olduğundan eyni kim-

yəvi quruluşa malik olan molekul enerjilərinə görə bir-birindən fərqlənən çoxlu sayda fəza quruluşlarına (konformasiyalara) malik olur. Hər konformasiya digərlərindən onun tərkibinə daxil olan atomların fəzada bir-birinə nəzərən müxtəlif cür yerləşmələri ilə fərqləndiyindən və belə müxtəlif quruluşlardan hər birinin özünəməxsus xüsusiyyətləri olduğundan bioloji molekulların konformasiya analizinin araşdırılması məsələsi kimi mühüm bir problemin həllinə ehtiyac yaranır. Bu ehtiyac həm də onunla əlaqədardır ki, bioloji molekulların hər konformasiyası özünə məxsus bioloji funksiya yerinə yetirə bilər. Deməli, orqanizmdə baş verən bioloji proseslərin mexanizmini öyrənmək üçün onu təş-

kil edən molekulların konformasiya analizini aparmaq lazımdır. Bioloji molekulun konformasiya analizini aparmaq, onun ala biləcəyi müxtəlif fəza quruluşlarını və hər fəza quruluşuna (uyğun gələn enerjini təyin etmək deməkdir

2. Tədqiqat obyektı və tədqiqat metodu

Orqanizmdə mövcud olan hər peptid özünəməxsus bir, yaxud bir neçə bioloji funksiya yerinə yetirir. Bu peptidlərdən biri də üç aminturşu qalığından ibarət olan Arg-Gly-Asp molekuludur. Arg-Gly-Asp tripeptidi hüceyrələr arasında əlaqə yaradılmasında iştirak edir [1]. Tripeptid molekulunun kimyəvi quruluşu şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Arg-Gly-Asp tripeptidinin kimyəvi quruluşu

Onun fəza quruluşu və bu quruluşların dəyişmə imkanları nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə öyrənilmişdir. Bu üsulun üstün cəhəti ondan ibarətdir ki, həmin üsul tək-cə molekulun fəza quruluşunu və bu quruluşun molekul daxilində mövcud

olan çox sayda birqat kimyəvi rabitələr ətrafındakı fırlanmalar nəticəsində dəyişmə imkanlarını öyrənməklə kifayətlənir. Tərtib olunmuş müvafiq hesablamalar proqramlarının [2-3] köməkliliyi ilə həmçinin molekul daxil olan istənilən iki atom ara-

sındakı məsafəni və beləliklə də molekulun ölçülərini molekulunu təşkil edən aminturşu qalıqları arasındakı, aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin bir-biri ilə, ana zəncirlərin bir-biri ilə, yan zəncirlərlə ana zəncirlərin qarşılıqlı təsir enerjilərini hesablamalıq, həmçinin hidrogen rabitələrinin uzunluqlarını və enerjilərini, molekulun quruluşunun stabilləşməsində iştirak edən digər (vander-vaals, elektrostatik və torsion) təsir enerjilərini hesablamalıq imkanı verir [4-18].

Hesablamaların sadələşdirilməsi üçün molekulun konformasiya halını xarakterizə edən xüsusi işarələmələrdən [4] istifadə olunmuşdur. Bu işarələmələrə əsasən ana zəncirin formasını molekulunu təşkil edən aminturşu qalıqlarının formaları müəyyənləşdirir. Aminturşu qalıqlarının forması isə ana zəncirin φ , ψ ikiüzlü daxili fırlanma bucaqlarının konkret qiymətləri ilə deyil, onların qiymətlər oblastı ilə xarakterizə olunan $R(\varphi = -180^\circ \div 0; \psi = -180^\circ \div 0^\circ)$, $B(\varphi = -180^\circ \div 0; \psi = 0^\circ \div 180^\circ)$, $L(\varphi = 0^\circ \div 180; \psi = 0^\circ \div 180^\circ)$ və $P(\varphi = 0^\circ \div 180; \psi = -180^\circ \div 0^\circ)$ ilə xarakterizə olunur. Ana zəncirin forması konformasiyalar toplusu ilə müəyyənləşdirilir. Bu zəncirin mümkün formaları iki qrupa ayrılır: e və f şeypləri [4]. Bu şeyplər ikiüzlü bucaqların müəyyən dəyişmə oblastları ilə müəyyən olunur: $e(B-B, B-R, L-B, L-R, R-L, R-P, P-L, P-P)$ və $f(R-R, R-B, B-L, L-L, B-P, L-P, P-R, P-B)$. e və f hərfləri, uyğun olaraq, ingiliscədən götürülmüş *extended* (dartılmış) və *folded* (bükülmüş) sözlərinin baş hərfləridir. e şeypdə ana zəncir dartılmış halda, f şeypdə isə bükülmüş halda olduğundan belə simvollardan istifadə olunmuşdur.

3. Hesablamalar və nəticələrin təhlili

Aparılan konformasiya analizi zamanı Arg-Gly-Asp tripeptidinin mümkün olan bütün şeypləri (ee, ef, ff, fe) nəzərə alınmışdır. Hesablamalarda molekulda daxil olan atomların sıraları şəkil 1-dəki kimidir. Hər şeypdə daxil olan kiçikenerjili konformasiyalar ayrı-

ayrı cədvəllərdə verilmişdir (cədvəl 1-4) Enerji baxımından ən əlverişli konformasiyalar, o cümlədən enerjisi $-14,77 \frac{kcal}{mol}$ olan

qlobal konformasiya ($B_2 RR_2$) ef şeypinə aiddir (Cədvəl 1). Qalıqlararası qarşılıqlı təsir baxımından qlobal konformasiyanın stabilləşməsində ən böyük əlavəni ($-23,49 \frac{kcal}{mol}$) birinci mövqedə yerləşən müsbət

yüklü arginin aminturşu qalığı ilə üçüncü mövqedə yerləşən mənfəi yüklü asparagin aminturşu qalığı arasındakı qarşılıqlı təsir verir. Qarşılıqlı təsir enerjilərinin növləri baxımından isə qlobal konformasiyanın stabilləşməsində mühüm rol qeyri-valent

($-8,96 \frac{kcal}{mol}$) və elektrostatik qarşılıqlı təsir

($-8 \frac{kcal}{mol}$) oynayır. Maraqlıdır ki, enerjisi

($-0,05 \frac{kcal}{mol}$) praktik olaraq qlobal konfor-

masiyanın enerjisinə bərabər olan B_2RR_3 konformasiyası da ef şeypinə aiddir. Belə yaxınlıq birinci mövqedəki arqinin yan zəncirinin fəzadakı vəziyyətinin dəyişməməsi, üçüncü mövqedəki asparagin turşusunun yan zəncirinin fəzadakı yerdəyişməsi zamanı əks işarəli parsial yüklü atomlar arasındakı məsafənin praktik olaraq sabit qalmasıdır. Enerjiləri bir-birinə çox yaxın olan bu iki konformasiyada molekulun ölçüləri də eynidir: B_2RR_2 qlobal konformasiyasında molekulun ölçülərini müəyyən edən atomlararası məsafələrin

$$\Delta d_1 = N_2 - C_{44} = 7,5 \overset{0}{\text{Å}} \text{ və}$$

$$\Delta d_2 = C_{18} - C_{41} = 8,2 \overset{0}{\text{Å}}$$

olduğu halda, B_2RR_3 konformasiyasında bu məsafələr $\Delta d_1 = N_2 - C_{44} = 7,4 \overset{0}{\text{Å}}$ və

$\Delta d_2 = C_{18} - C_{41} = 8 \overset{0}{\text{Å}}$ (Cədvəl 1). Qlobal konformasiyanın daxil olduğu ef şeypində

$0-5 \frac{kcal}{mol}$ enerji intervalına 5 konformasiya,

0-3 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalına isə 3 konformasiya düşür. Konformasiyaların belə pay-

lanması tripeptidin *ef* şeypinin nisbətən hərəkətli (labil) olmasını göstərir.

Cədvəl 1. *ef* şeypinin kiçikenerjili konformasiyaları və atomlararası məsafə (enerji $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$, məsafə Å -lə ölçülür)

<i>ef</i> şeypinin konformasiyaları	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{tors}	E_{tam}	$E_{nis(e)}$	E_{nis}	Δd_1 (N ₂ -C ₄₄)	Δd_2 (C ₁₆ -C ₄₁)
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
B1 R R1	-0.88	-1.91	-20.21	-6.98	-6.44	1.71	-11.71	3.06	3.06	7.4	8.1
B1 R R2	-1.09	-1.91	-20.02	-5.69	-6.76	1.3	-11.16	3.61	3.61	7.5	7.8
B1 R R3	-1.43	-1.67	-20.33	-7.29	-6.75	1.27	-12.77	2	2	7.4	7.7
B2 R R1	-0.96	-1.82	-23.17	-9.13	-8.37	3.71	-13.79	0.98	0.98	7.4	8
B2 R R2	-0.48	-1.8	-23.49	-8.96	-8	2.19	-14.77	0	0	7.5	8.2
B2 R R3	-0.56	-1.62	-23.3	-9.86	-7.48	2.61	-14.72	0.05	0.05	7.6	8.2
B3 R R1	-1.6	-1.86	-21.21	-7.67	-7.45	2.86	-12.26	2.51	2.51	7.7	6.7
B3 R R2	-1.47	-2	-20.98	-7	-6.45	4.1	-9.35	5.42	5.42	7.5	8.5
B3 R R3	-1.42	-1.7	-19.28	-6.09	-6.24	4.65	-7.67	7.1	7.1	8.1	8.2
L2 R R1	-1.21	-1.88	-12.22	-5.18	-1.09	0.72	-5.55	9.22	9.22	7.4	11.8
L2 R R3	-1.25	-1.83	-12.16	-5.29	-0.98	0.79	-5.48	9.29	9.29	7.5	11.6

Tripeptidin *ee* şeypində güclü diferensasiya müşahidə olunur (Cədvəl 2). Burada 0-5 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalında cəmi bir konformasiya ($E_{nisbi} = 3,88 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$) mövcuddur. Hə-

min konformasiyanın stabilləşməsində də ən böyük əlavə qeyri-valent ($-8,11 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$) və elektrostatik ($-7,75 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$) qarşılıqlı təsirlər hesabınadır.

Cədvəl 2. *ee* şeypinin kiçikenerjili konformasiyaları və atomlararası məsafə (enerji $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$, məsafə Å -lə ölçülür)

<i>ee</i> şeypinin konformasiyaları	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{tors}	E_{tam}	$E_{nis(ee)}$	E_{nis}	Δd_1 (N ₂ -C ₄₄)	Δd_2 (C ₁₆ -C ₄₁)
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
B3 B B1	-3.16	2.07	-23.39	-5.23	-9.27	8.04	-6.46	4.43	8.31	6.8	4.4
B3 B B3	-1.75	-1.55	-22.32	-8.11	-7.75	4.97	-10.89	0	3.88	7.4	6.7
R2 L R2	1.98	0.99	-20.02	-1.11	-6.67	5.78	-2.01	8.88	12.76	6.8	4.8
L2 B B1	-1.18	-1.9	-12.32	-5.15	-1.15	0.64	-5.66	5.23	9.11	7.4	11.9
L2 B B3	-0.92	-1.7	-12.28	-5.16	-0.86	0.58	-5.44	5.45	9.33	7.1	12
L3 B B3	-1.15	-1.93	-11.9	-4.19	0.02	3.28	-0.89	10	13.88	7.9	12.3

Arg-Gly-Asp tripeptid molekulunun *ff* şeypində 0-5 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalına 8 konformasiya, 0-3 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalına isə 3 konformasiya düşür (Cədvəl 3). Bu şeypin qlobal konformasiyasının enerjisi tripeptidin qlobal konformasiyasının enerjisindən

1,59 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ böyükdür. 0-5 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalına 8 konformasiyanın, 0-3 $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$ enerji intervalına isə 3 konformasiyanın uyğun gəldiyi *ff* şeypinin də konformasiya hərəkətliliyinə malik olduğundan xəbər verir.

Cədvəl 3. *ff* şəypinin kiçikenerjli konformasiyaları və atomlararası məsafə (enerji $\frac{kcal}{mol}$, məsafə $\overset{0}{A}$ -lə ölçülür)

<i>ff</i> şəypinin konformasiya yaları	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{torz}	E_{tazn}	$E_{nis(ff)}$	E_{nis}	Δd_1 (N_2-C_{44})	Δd_2 ($C_{16}-C_{41}$)
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
R1 R R3	4.1	-1.67	-20.77	-3.1	-5.28	4.34	-4.05	9.13	10.72	8.5	4.6
R3 R R1	1.25	-1.77	-17.99	-4.72	-4.26	4.21	-4.78	8.4	9.99	8.6	5.4
R3 R R2	2.35	-1.66	-17.7	-3.56	-3.89	2.97	-4.47	8.71	10.3	8.4	5.3
R3 R R3	2.37	-1.61	-18.47	-3.91	-4.48	3.65	-4.74	8.44	10.03	8.6	5.2
B1 P R1	-2.11	-1.61	-20.96	-8.24	-6.49	1.56	-13.18	0	1.59	9.5	4.1
B1 P R2	-0.94	-2.58	-21.19	-8.3	-5.7	4.31	-9.69	3.49	5.08	9	4.3
B1 P R3	-1.9	-1.33	-17.87	-6.7	-5.19	2.28	-9.62	3.56	5.15	9.4	4
B2 P R1	-0.82	-2.12	-21.79	-7.97	-6.43	5.01	-9.39	3.79	5.38	8.5	3.3
B2 P R2	-0.21	-0.69	-14.16	-6.2	-0.8	1.98	-5.02	8.16	9.75	5.9	12.1
B2 P R3	-0.65	-1.03	-18.22	-8.56	-3.37	1.89	-10.03	3.15	4.74	7.1	10.4
L2 P R1	-0.9	-0.46	-19.81	-7.71	-4.41	1.92	-10.2	2.98	4.57	8.6	3.8
L2 P R2	-1.42	-0.87	-19.81	-6.2	-6.18	1.43	-10.96	2.22	3.81	9.2	3.8
L2 P R3	-2.1	-1.38	-19.05	-6.77	-5.59	3.48	-8.88	4.3	5.89	9.1	3.8
L3 P R1	-0.2	-0.78	-19.99	-5.74	-4.72	5.5	-4.97	8.21	9.8	7.6	4.4
L3 P R3	-1.35	-0.94	-17.92	-5.89	-3.96	6.11	-3.74	9.44	11.03	8	4.8

Molekulun *fe* şəypinin bütün konformasiyaları enerjiləri görə çox əlverişsizdir (Cədvəl 4). Bu şəypin global konformasiyasının enerjisi molekulun ümumi qlobal konformasiyasının enerjisindən kifayət qə-

dər ($7,82 \frac{kcal}{mol}$ qədər) böyükdür. Məhz bu səbəbdən *fe* şəypinin mümkün olan bütün konformasiyalarının bioloji aktiv olmadığı fikrinə gəlinir.

Cədvəl 4. *fe* şəypinin kiçik enerjli konformasiyaları və atomlararası məsafə (enerji $\frac{kcal}{mol}$, məsafə $\overset{0}{A}$ -lə ölçülür)

<i>fe</i> şəypinin konformasiya yaları	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{torz}	E_{tazn}	$E_{nis(fe)}$	E_{nis}	Δd_1 (N_2-C_{44})	Δd_2 ($C_{16}-C_{41}$)
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
R1 B B1	1.93	0.97	-18.4	-1.2	-3.74	6.87	1.93	8.88	16.7	6.5	10.3
R1 B B2	1.87	-0.59	-18.71	-2.09	-4.07	7.52	1.35	8.3	16.12	6.5	10.3
R1 B B3	2.22	0.13	-18.74	-1.97	-4.03	7.33	1.34	8.29	16.11	6.5	10.2
R2 B B1	1.7	-1.4	-23.88	-5.98	-8.18	16.72	2.56	9.51	17.33	7.1	7.1
R2 B B3	2.76	-1.09	-24.66	-4.85	-8.64	15.75	2.26	9.21	17.03	7.1	7.1
B1 L R1	-1.13	1.31	-18.45	-3.67	-4.12	6.85	-0.93	6.02	13.84	6.3	10.5
B1 L R2	-0.96	-0.17	-18.1	-3.41	-4.16	7.53	-0.05	6.9	14.72	6	11.2
B1 L R3	-1.1	0.33	-18.33	-4.75	-3.93	7.76	-0.91	6.04	13.86	6.3	10.6
B2 L R1	-1.15	-0.86	-24.76	-9.47	-8.56	12	-6.03	0.92	8.74	7.3	7.3
B2 L R2	-1.14	-2.59	-24.52	-9.25	-9.07	20.92	2.6	9.55	17.37	7.7	7.4
B2 L R3	-1.2	-2.19	-25.67	-11.38	-8.98	14.18	-6.18	0.77	8.59	7.4	6.6
B3 L R1	-0.37	-1.36	-21.99	-6.87	-7.56	7.95	-6.48	0.47	8.29	6.2	8.9
B3 L R3	-0.8	-0.04	-24.47	-7.11	-8.39	9.5	-5.99	0.96	8.78	6.8	8
L2 L R1	-1.11	0.2	-22.35	-5.71	-7.69	9.14	-4.26	2.69	10.51	6.9	6.9
L2 L R2	-0.83	-1.9	-22.19	-7.79	-6.76	17.05	2.49	9.44	17.26	6.7	8
L2 L R3	-1.29	0.25	-22.4	-6.42	-7.39	6.87	-6.95	0	7.82	6.5	5.6
L3 L R1	-0.96	0.26	-18.93	-3.81	-4.86	7.58	-1.09	5.86	13.68	6.2	7.7
L3 L R3	-1.01	0.38	-19.78	-4.34	-4.95	9.22	-0.07	6.88	14.7	6.3	7.5

Cədvəl 5-də ikinci mövqedəki azot atomu ilə qırxdördüncü mövqedəki karbon atomu arasındakı məsafənin müxtəlif şeyplərə daxil olan kiçikenerjili konformasiyalardan asılılığı verilmişdir. Cədvəldən görüldüyü kimi, bu məsafənin ən kiçik qiyməti

($\Delta d_1 = 5,9 \text{ \AA}$) *ff* şeypinin B_2PR_2 konformasiyasına uyğun gəlir. Molekulun qlobal konformasiyasında (*ef* şeypinin B_2RR_2 konformasiyasında) $\Delta d_1 = 7,5 \text{ \AA}$.

Cədvəl 5. Arg-Gly-Asp tripeptid molekulunun kiçikenerjili konformasiyalarının $\Delta d_1 = N_2 - C_{44}$ məsafəsinə görə sıralanması (enerji $\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$, məsafə \AA -lə ölçülür)

	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{tors}	E_{tam}	$E_{üz}$	Δd_1 (N_2-C_{44})	Δd_2 ($C_{18}-C_{41}$)	şeypler
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
B2 P R2	-0.21	-0.69	-14.16	-6.2	-0.8	1.98	-5.02	9.75	5.9	12.1	ff
B3 L R1	-0.37	-1.36	-21.99	-6.87	-7.56	7.95	-6.48	8.29	6.2	8.9	fe
L2 L R3	-1.29	0.25	-22.4	-6.42	-7.39	6.87	-6.95	7.82	6.5	5.6	fe
B3 B B1	-3.16	2.07	-23.39	-5.23	-9.27	8.04	-6.46	8.31	6.8	4.4	ee
B3 L R3	-0.8	-0.04	-24.47	-7.11	-8.39	9.5	-5.99	8.78	6.8	8	fe
B2 P R3	-0.65	-1.03	-18.22	-8.56	-3.37	1.89	-10.03	4.74	7.1	10.4	ff
L2 B B3	-0.92	-1.7	-12.28	-5.16	-0.86	0.58	-5.44	9.33	7.1	12	ee
B2 L R1	-1.15	-0.86	-24.76	-9.47	-8.56	12	-6.03	8.74	7.3	7.3	fe
B2 R R1	-0.96	-1.82	-23.17	-9.13	-8.37	3.71	-13.79	0.98	7.4	8	ef
B1 R R3	-1.43	-1.67	-20.33	-7.29	-6.75	1.27	-12.77	2	7.4	7.7	ef
B1 R R1	-0.88	-1.91	-20.21	-6.98	-6.44	1.71	-11.71	3.06	7.4	8.1	ef
B3 B B3	-1.75	-1.55	-22.32	-8.11	-7.75	4.97	-10.89	3.88	7.4	6.7	ee
B2 L R3	-1.2	-2.19	-25.67	-11.38	-8.98	14.18	-6.18	8.59	7.4	6.6	fe
L2 B B1	-1.18	-1.9	-12.32	-5.15	-1.15	0.64	-5.66	9.11	7.4	11.9	ee
L2 R R1	-1.21	-1.88	-12.22	-5.18	-1.09	0.72	-5.55	9.22	7.4	11.8	ef
B2 R R2	-0.48	-1.8	-23.49	-8.96	-8	2.19	-14.77	0	7.5	8.2	ef
B1 R R2	-1.09	-1.91	-20.02	-5.69	-6.76	1.3	-11.16	3.61	7.5	7.8	ef
B3 R R2	-1.47	-2	-20.98	-7	-6.45	4.1	-9.35	5.42	7.5	8.5	ef
L2 R R3	-1.25	-1.83	-12.16	-5.29	-0.98	0.79	-5.48	9.29	7.5	11.6	ef

Cədvəl 6-da isə onşəkkizinci mövqedəki karbon atomu ilə qırxbirinci mövqedəki karbon atomu arasındakı məsafənin müxtəlif şeyplərə daxil olan kiçikenerjili konformasiyalardan asılılığı verilmişdir. Cədvəldən görüldüyü kimi, bu məsafənin ən kiçik qiyməti ($\Delta d_2 = 3,3 \text{ \AA}$) *ff* şeypinin B_2PR_1 konformasiyasına uyğun gəlir. Molekulun qlobal konformasiyasında (*ef* şeypinin

B_2RR_2 konformasiyasında) $\Delta d_1 = 8,2 \text{ \AA}$.

Beləliklə, aparılan konformasiya analizindən alınan nəticələrin təhlili göstərir ki, Arg-Gly-Asp tripeptidinin güman olunan bioloji aktiv konformasiyası *ef* şeypinin B_2RR_2 konformasiyası və enerji baxımından ona çox yaxın olan *ef* şeypinin B_2RR_3 konformasiyasıdır.

Cədvəl 6. Arg-Gly-Asp tripeptid molekulunun kiçikenerjili konformasiyalarının $\Delta d_2 = N_{18} - C_{41}$ məsafəsinə görə sıralanması (enerji $\frac{kcal}{mol}$, məsafə Å -lə ölçülür)

	Qalıqlar arası qarşılıqlı təsir enerjiləri			E_{qv}	E_{ee}	E_{tors}	E_{tan}	$E_{rüz}$	Δd_1 (N_2-C_{44})	Δd_2 ($C_{18}-C_{41}$)	şeypler
	Arg-Gly	Gly-Asp	Arg-Asp								
B2 P R1	-0.82	-2.12	-21.79	-7.97	-6.43	5.01	-9.39	5.38	8.5	3.3	ff
L2 P R1	-0.9	-0.46	-19.81	-7.71	-4.41	1.92	-10.2	4.57	8.6	3.8	ff
L2 P R3	-2.1	-1.38	-19.05	-6.77	-5.59	3.48	-8.88	5.89	9.1	3.8	ff
L2 P R2	-1.42	-0.87	-19.81	-6.2	-6.18	1.43	-10.96	3.81	9.2	3.8	ff
B1 P R3	-1.9	-1.33	-17.87	-6.7	-5.19	2.28	-9.62	5.15	9.4	4	ff
B1 P R1	-2.11	-1.61	-20.96	-8.24	-6.49	1.56	-13.18	1.59	9.5	4.1	ff
B1 P R2	-0.94	-2.58	-21.19	-8.3	-5.7	4.31	-9.69	5.08	9	4.3	ff
B3 B B1	-3.16	2.07	-23.39	-5.23	-9.27	8.04	-6.46	8.31	6.8	4.4	ee
L3 P R1	-0.2	-0.78	-19.99	-5.74	-4.72	5.5	-4.97	9.8	7.6	4.4	ff
R3 R R1	1.25	-1.77	-17.99	-4.72	-4.26	4.21	-4.78	9.99	8.6	5.4	ff
L2 L R3	-1.29	0.25	-22.4	-6.42	-7.39	6.87	-6.95	7.82	6.5	5.6	fe
B2 L R3	-1.2	-2.19	-25.67	-11.38	-8.98	14.18	-6.18	8.59	7.4	6.6	fe
B3 B B3	-1.75	-1.55	-22.32	-8.11	-7.75	4.97	-10.89	3.88	7.4	6.7	ee
B3 R R1	-1.6	-1.86	-21.21	-7.67	-7.45	2.86	-12.26	2.51	7.7	6.7	ef
B2 L R1	-1.15	-0.86	-24.76	-9.47	-8.56	12	-6.03	8.74	7.3	7.3	fe
B1 R R3	-1.43	-1.67	-20.33	-7.29	-6.75	1.27	-12.77	2	7.4	7.7	ef
B1 R R2	-1.09	-1.91	-20.02	-5.69	-6.76	1.3	-11.16	3.61	7.5	7.8	ef
B3 L R3	-0.8	-0.04	-24.47	-7.11	-8.39	9.5	-5.99	8.78	6.8	8	fe
B2 R R1	-0.96	-1.82	-23.17	-9.13	-8.37	3.71	-13.79	0.98	7.4	8	ef
B1 R R1	-0.88	-1.91	-20.21	-6.98	-6.44	1.71	-11.71	3.06	7.4	8.1	ef
B2 R R2	-0.48	-1.8	-23.49	-8.96	-8	2.19	-14.77	0	7.5	8.2	ef
B2 R R3	-0.56	-1.62	-23.3	-9.86	-7.48	2.61	-14.72	0.05	7.6	8.2	ef
B3 R R3	-1.42	-1.7	-19.28	-6.09	-6.24	4.65	-7.67	7.1	8.1	8.2	ef

ƏDƏBİYYAT

1. V.Alberts, D.Bray, J.Levis, M.Raff, K.Roberts, J.D.Watson. Molecular Bioloji of the Cell. Garland Publishing, Inc. New York-London 1983
2. Godjaev N.M., Maksumov I.C. Алгоритм расчета конформаций биополимеров. Ученые Записки АГУ (сер. физ.-мат.наук), 1979, № 5, с.157-162.
3. Maksumov I.C., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. Журнал структурной химии, 1983, т. 24, № 4, с.147-148.
4. Годжаев Н.М., Касумова Л.И., Попов Е.М. Препринт Института Теоретической Физики АН УССР, ИТФ-79-45Р. Киев, 1979, с.3-58.
5. Godjajev N.M. Studia Biophysica, 1986, v.113, No. 1-2, p.89-94.
6. Алиева И.Н., Велиева Л.И., Годжаев Н.М. Журнал «Биофизика», 2005, т.50, № 2, с. 197-202.
7. Годжаев Н.М., Алиев Р.Э., Попов Е.М. Журнал «Молекулярная биология», 1986, т. 20, вып. 1, с. 102-119.
8. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М., Годжаев Н.М. Журнал «Био-органическая химия», 2005, т.31, №1, с. 31-38.
9. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М., Годжаев Н.М. Журнал «Био-органическая химия», 2005, т. 35, № 2, с.140-146.
10. Ахвердиева Г.А., Набиев Н.С., Годжаев Н.М. Конформационные исследования киноторфина и его биологически активного аналога, Журнал «Биофизика», 2005, т.50, №1, с.5-12.
11. Агаева Г.А., Керимли Н.Н., Годжаев Н.М. Журнал «Биофизика», 2005, т. 50, вып.2, с.203-214.
12. Агаева Г.А., Керимли Н.Н., Годжаев Н.М., Журнал «Биофизика», 2005, т. 50, вып.2, с.404-412.
13. Агаева Г.А., Керимли Н.Н., Годжаев Н.М., Журнал «Биофизика», 2005, т. 50, вып.3, с.203-214.
14. Alieva I.N., Mustafayeva N.N., Godjajev N.M. Journal of Molecular Structure, 2006, v.785, iss.1-3, p.76-84.
15. Alieva I.N., Velieva L.I., Musayev M.A., Gojajev N.M., Journal of Protein and Peptide Letters, 2006, v.13, No.10, p.1007-1015.
16. Л.И.Исмаилова, Р.М.Аббаслы, Н.А.Ахмедов, Н.М.Годжаев, Российский аллергологический журнал, №1, с.119-120, 2008.
17. С.Д.Демухамедова, И.Н.Алиева, Н.М.Годжаев. Российский аллергологический журнал, №1, с.81-82, 2008.
18. G.A.Akverdieva, N.M.Godjaev, S.Akyuz. Journal of Molecular Structure, v. 917, p. 22-26, 2009.