

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI TƏHSİL NAZİRLİYİ
BAKİ DÖVLƏT UNİVERSİTETİ

FİZKA PROBLEMLƏRİ ELMİ-TƏDQİQAT İNSTİTUTU

NƏZƏRİ FİZİKA ŞÖBƏSİ
molekulyar biofizika laboratoriyası

Bioloji proseslərin molekulyar təşkilinin fiziki əsasları

BİOLOJİ FƏAL MOLEKULLARIN VƏ KOMPLEKSLƏRİNİN FƏZA
QURULUŞLARI, QURULUŞ –FUNKSİYA ƏLAQƏLƏRİ

mövzusunda 2009 –cu il üçün

H E S A B A T I

Nəzəri fizika
şöbəsinin müdiri

prof. Qocayev N.M.

B A K İ – 2 0 0 9

1. GİRİŞ

Biomolekulların yerinə yetirdikləri funksiyaların molekulyar mexanizmlərini öyrənmək üçün onların fəza quruluşları və dinamik konformasiya imkanları məlum olmalıdır. Biomolekulların fəza quruluşlarının və dinamik konformasiya xüsusiyyətlərinin müəyyən edilməsi isə öz növbəsində canlı orqanizmdə gedən bir çox fizioloji proseslərin molekul-atom səviyyəsində izah edilməsinə imkan verir. Digər tərəfdən peptid molekullarının fəza quruluşlarının müəyyən edilməsi təbii molekulun yalnız müəyyən funksiyasını özündə saxlayan süni analoglarını sintez üçün təklif etməyə imkan verir və bunun əsasında dərman preparatlarının yaradılması nəzəri proqramlaşdırmaq olur.

Nəzəri fizika şöbəsinin Molekulyar biofizika laboratoriyasının əməkdaşları tərəfindən nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə maymodulinlər fəsiləsinə daxil olan molekulların, nootrop və neyroprotektor xassəli peptid molekullarının, opioid peptidləri fəsiləsinə daxil olan peptid T və hemorfin molekulların fəza quruluşları tədqiq olunmuşdur. Taxikinin neyropeptidlər fəsiləsinə aid olan kassinin molekulun analoqlarının konformasiya imkanları molekulyar mexanika və molekulyar dinamika üsulları ilə öyrənilmişdir. Asetilaseton molekulunun azotlu törəmələrinin tautomer formalarının (enol-azo, keto-azo və hydro-azo) elektron quruluşu öyrənilmişdir. Karnozin molekulunun sink və mis metalları ilə kompleksinin elektron və fəza quruluşu PM3 yarımempirik kvant kimyası üsulu ilə öyrənilmişdir. HyperChem proqram paketinə daxil olan polimer proqram mənimsənilmiş və 10 (on) monomerdən ibarət karnozin-sink kompleksinin polimerinin modeli yaradılmışdır.

2. MOLEKULAR BIOFİZİKA LABORATORİYASININ STRUKTUR VƏ ŞTAT CƏDVƏLİ

Hal–hazırda laboratoriyada 16 nəfər əməkdaş çalışır. Onlardan 4 nəfər əməkdaş elmlər doktoru, 9 əməkdaş işə elmlər namizədidir. Əməkdaşların 11 nəfəri tam ştat, 5 nəfəri 0.5 ştat vahidində çalışır.

İCRAÇILARIN STRUKTUR VƏ ŞTAT CƏDVƏLİ

№	Soyadı, adı, atasının adı	Təvəllüdü	Vəzifə	Elmi adı, elmi dərəcəsi	Ştat vahidi
1	Qocayev N.M	1936	Şöbə müdiri	f.r.e.d. prof.	(0.5şt.)
2	Əliyeva İ.N	1959	Baş elmi işçi	b.e.d. prof.	(0.5şt.)
3	Əhmədov N.A.	1949	Baş elmi işçi	f.r.e.d. prof.	1
4	Məmmədov Q.Q.	1934	Baş elmi işçi	f.r.e.d. prof.	1
5	İsmayılova L.İ.	1952	Aparıcı e.i.	f.r.e.n.	1
6	Demuxamedova S.D.	1950	Aparıcı e.i.	f.r.e.n.	1
7	Ağayeva G.Ə.	1954	Aparıcı e.i.	f.r.e.n.	1
8	Haqverdiyeva G.Ə.	1959	Aparıcı e.i.	f.r.e.n.	1
9	Abbaslı R.M.	1954	Böyük e.i.	b.e.n.	1
10	İmamova T.Ə.	1960	Elmi işçi	g.m.e.n.	1
11	Ağayeva Ü.T	1976	Elmi işçi	-	1
12	Həsənova X.T.	1959	Laborant	-	1
13	Bayramova D.B.	1974	Laborant	-	1
14	Paşayev F.H.	1955	Aparıcı e.i.	f.r.e.n.	(0.5şt.)
15	Hacıyev Z.İ.	1948	Böyük e.i.	f.r.e.n.	(0.5şt.)
16	Həsənov A.Q.	1959	Böyük e.i.	f.r.e.n.	(0.5şt.)

3. ELMİ –TƏDQIQAT İŞLƏRİNİN ƏSAS İSTIQAMƏTLƏRİ, ADI, SAYI, QISA ANNOTASIYASI VƏ YERİNƏ YETİRİLMƏSİ

Problem 1: Bioloji proseslərin molekulyar təşkilinin fiziki əsasları

Mövzu 1: Bioloji fəal molekulların və komplekslərinin fəza quruluşları, quruluş–funksiya əlaqələri

İş 1: : İNGİBİTOR XASSƏLİ MAYMODULİN MOLEKULLARININ FƏZA QURULUŞLARININ TƏDQIQI.

İcraçılar: b.e.i. Əhmədov N.A., b.e.i. Abbashı R.M., a.e.i. İsmayılova L.İ.

Maymodulin sensor neyronlarının elektro-fizioloji effektlərini ingibirləşdirən neyropeptid molekullarıdır. Maymodulinlər fəsiləsinə daxil olan

Pro1-Met2-Ser3-Met4-Leu5-Met6-Leu7-NH₂ maymodulin A

Gly1-Ser2-Tyr3-Arg4-Met5-Met6-Arg7-Leu8-NH₂ maymodulin B

Gly1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ maymodulin D

molekullarının fəza quruluşları nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə onları fraqmentlərə ayırmaqla öyrənilmişdir. Maymodulin A və D molekullarının fəza quruluşlarının tədqiqi göstərir ki, əsas zəncirin formalarının və konformasiyalarının enerjilərinə görə kəskin diferensiasiya gedir. 0-8,0 kkal/mol enerji intervalına maymodulin A molekulunun 12 konformasiyası, maymodulin B molekulunun 9 konformasiyası düşür.

Maymodulin B molekulun fəza quruluşu isə çoxlu saylı alçaqenerjili konformasiyalarda tərənnüm olunur. Maymodulin molekullarının yan zəncirlərinin konformasiya sərbəstliyi öyrənilmiş, onların müxtəlif reseptorlarda qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edə biləcəkləri göstərilmişdir.

İŞ 2: MET-GLU-HIS-PHE-PRO-GLY-PRO HEPTAPEPTID MOLEKULUNUN ELEKTRON-KONFORMASIYA QURULUŞLARININ TƏDQIQI

İcraçılar: aparıcı elmi işçi, f.r.e.n. İsmayılova L.İ., böyük elmi işçi, b.e.n. Abbashı R.M., baş elmi işçi, f.r.e.d. Əhmədov N.A.

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə nootrop və neyroprotektor xassəli, sintetik heptapeptid Semaks molekulunun konformasiya imkanları öyrənilmişdir. Molekulu XXI əsrin dərman maddəsi adlandırırlar. Hesablamalar molekulun mexaniki modeli əsasında qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərini və hidrogen rabitəsi enerjisini nəzərə almaqla aparılmışdır. Heptapeptid molekulun aminturşu qalıqları ardıcılığına əsasən onun aşağıdakı konformasiya analizi sxemi seçilmişdir. İlk mərhələdə iki tripeptid Met1-Glu2-His3 və Pro5-Gly6-Pro7, tetrapeptid Met1-Glu2-His3-Phe4 və Phe4-Pro5-Gly6-Pro7, pentapeptid His3-Phe4-Pro5-Gly6-Pro7 fraqmentlərinin konformasiya imkanları öyrənilmişdir. Sonra birinci N-kənar tetrapeptid fraqmentinin və C-kənar pentapeptid fraqmentinin alçaqenerjili konformasiyaları əsasında bütün heptapeptid molekulunun konformasiya imkanları öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, heptapeptid molekulun fəza quruluşu əsas

zəncirin yeddi forması ilə tərənnüm olunur. Heptapeptid molekulunun enerji və həndəsi parametrləri təyin edilmişdir. Kvant kimyası üsulları ilə molekulun elektron xassələri tədqiq edilmişdir. Heptapeptid molekulunun bütün alçaqenerjili konformasiyalarında molekulun enerji xüsusiyyətləri, dipol momenti, atomlarda yüklərin paylanması təyin edilmişdir.

İŞ 3: KARNOZİNİN NƏZƏRİ INFRAQIRMIZI SPEKTRİNİN LEV PROQRAMMI İLƏ HESABLANMASI VƏ KARNOZİN DİPEPTİDİNİN NƏZƏRİ KONFORMASIYA ANALIZI.

İcraçılar: İ.N.Əliyeva, S.D.Demuxamedova, Z.İ.Hacıyev

Hesabat dövründə karnozin molekulunun sink və mis metalları ilə kompleksinin elektron və fəza quruluşu PM3 yarımempirik kvant kimyası üsulu ilə öyrənilmişdir. Monomer və dimer komplekslərin quruluşu tədqiq olunmuşdur. Hesablamalar karnozin molekulundakı imidazol həlqəsinin iki tautomer forması üçün aparılmışdır. Karnozinin sink və mis atomları ilə monomer, sink atomu ilə dimer komplekslərində atomlarda elektronların məskunlaşması təhlil edilmişdir. Sink və mis atomları ilə karnozin-monomer komplekslərinin elektron quruluşu və atomlarda elektronların məskunlaşması müqayisə olunmuşdur. Hesabat dövründə yeni ChemOffice proqramı öyrənilmiş və tam mənimsənilmişdir. Karnozin molekulunun iki tautomer forması ChemOffice proqramı kompleksinə daxil olan MOPAC və GAUSSIAN proqramları ilə tədqiq olunmuşdur. Karnozin molekulunun həndəsi, enerji və spektral parametrləri MOPAC proqramındakı PM3 yarımempirik kvant kimyası və GAUSSIAN proqramı ilə Xartri Fok usulundan istifadə edərək yerinə yetirilmişdir. Hər iki halda optimallaşdırmadan sonra karnozin molekulunun İQ rəqs spektri hesablanmışdır.

İŞ-4. KARNOZİN MOLEKULUNUN ZN-LƏ POLİMER MODELİNİN VƏ POLİETİLENİN ADSORBSIYA EDİLMİŞ CDS MOLEKULU İLƏ MODELİNİN YARADILMASI.

İcraçılar: İ.N.Əliyeva, S.D.Demuxamedova, Z.İ.Hacıyev

HyperChem proqramı paketinə daxil olan polimer proqramı mənimsənilmiş və 10 (on) monomerdən ibarət karnozin-sink kompleksinin polimerinin modeli yaradılmışdır. Myxtəlif sayda monomer vahidi olan polietilen və poliakrilonitril polimerlərinin modeli yaradılmışdır.

İŞ 5: QİÇS-Ə QARŞI TƏSİR GÖSTƏRƏN PEPTİD T-nin VƏ HEMORFİN OPIOİD PEPTİDLƏRİNİN BİOLOJİ AKTİV QURULUŞLARI

İcraçı: a.e.i. Haqverdiyeva G.Ə.

Farmakoloji preparatların - QİÇS-ə qarşı təsir göstərən peptid T –nin və hemorfin opioid peptidlərinin bioloji aktiv quruluşları tədqiq olunmuşdur. Peptid T-nin (Ala1-Ser2-Thr3-Thr4-Thr5-Asn6-Tyr7-Thr8) bir sıra analoqları – qlisin ilə nöqtəvi əvəz edilmə və amin turşu qalıqlarının D-modifikasiya yolu ilə alınmış aktiv

və qeyri-aktiv analoqları tədqiq olunmuşdur. Bu tədqiqatlar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, bu peptidin fizioloji aktiv forması siklik konformasiya ilə təsvir olunur və onun C-uclu aktiv pentapeptid hissəsinin polipeptid zənciri beta-dönüş ilə xarakterizə olunur.

Hemorfinlər endogen peptidlər olaraq, «qeyri-klassik», başqa sözlə desək tipik olmayan opioid peptidlər sinfinə aiddirlər. Müəyyən olunmuşdur ki, hemorfinlər bir sıra fizioloji funksiya yerinə yetirirlər. Onlar bir sıra bioloji aktiv molekulların fəaliyyətini tənzimləyirlər. Hemorfin sinfinə (Leu-Val-Val-Tyr-Pro-Trp-Thr-Gln-Arg-Phe) mənsub olan muxtəlif uzunluqda olan peptidlərin fəza quruluşlarının nəzəri tədqiqatı aparılmışdır. Onlardan molekulyar çəkisi ən bəliymiş nəticələri bioloji testlər ilə müqaisə edərək hemorfinlərin bioloji aktiv konformasiyaları modelləşdirilmişdir. Mexaniki model çərçivəsində 4 – 10 amin turşularından ibarət olan hemorfinlərin aşağı enerjili konformasiyaların enerji və həndəsi parametrləri müəyyənlanmışdır, sonrakı etapda isə AM1 kvantkimyavi metodun köməyi ilə bu quruluşlar dəqiqləşdirilmişdir. Elektron quruluşunu xarakterizə edən elektrik dipol momenti, atomların parsial yükləri, elektron sıxlığının paylanması kimi parametrlər hesablanmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, molekulların N- və C-uc hissələrinə nəzərən hemorfin-4 peptidinin ardıcılığına uyğun gələn mərkəzi Tyr-Pro-Trp-Thr tetrapeptid fraqment konformasiya sərtliyinə malikdir. Tədqiq olunmuş peptidlərin optimal quruluşlarının bu seqmentində peptid zəncirinin dönüşü aşkar olunmuşdur. Alınmış nəticələr bu tetrapeptid fraqmentinə hemorfinlərin spesifik təsirlərinə cavab verən aktiv mərkəz kimi baxmağa imkan verir

İŞ 6 KASSININ MOLEKULUNUN ANALOGLARININ KONFORMASIYA XUSUSIYYƏTLƏRİNİN TƏDQIQI

İcraçı: aparıcı elmi işçi Ağayeva G.Ə.

Taxikinin neuropeptidlər ailəsinə aid olan kassinin molekulun (H-Asp¹-Val²-Pro³-Lys⁴-Ser⁵-Asp⁶-Gln⁷-Phe⁸-Phe⁹-Gly¹⁰-Leu¹¹-Met¹²-NH₂) analoqlarının müqaisəli konformasiya analizi molekulyar mexanika və molekulyar dinamika metodları ilə aparılmışdır. Tədqiqatın birinci mərhələsində kassinin molekulunun enterokassin adlı analoqunun (H-Asp¹-Glu²-Pro³-Asn⁴-Ser⁵-Asp⁶-Gln⁷-Phe⁸-Ile⁹-Gly¹⁰-Leu¹¹-Met¹²-NH₂) fəza quruluşu tədqiq olunmuşdur. Enterokassinin kassinindən fərqli olaraq hüceyrə membranında ion nəqlini stimullaşdırmır. Aparılan tədqiqatlar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, bu peptidin də kassinin molekulunu kimi ən stabil konformasiyalarının C-uclu aktiv pentapeptid hissəsinin əsas zənciri alfa-spiral quruluşu ilə xarakterizə olunur. Enterokassinin bioloji xassələrinin fərqi onun N-uclu hissəsindəki quruluşdan və bununla bağlı olan konformasiya sərtliyi ilə izah olunur. Molekular mexanika üsulu ilə enterokassinin molekulunun bütün optimal konformasiyaların atomlarının koordinatları, enerji və həndəsi parametrləri müəyyənləşdirilmişdir. Sonra isə enterokassinin molekulunun seçilmiş ən optimal fəza quruluşlarının dayanaqlığı molekulyar dinamika üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Bu tədqiqatların nəticəsində enterokassinin molekulunun fəza quruluşu modelləşdirilmişdir. Sonrakı mərhələdə kassinin molekulunun tərkibindəki amin

turşusu qalıqlarının ana molekulun fəza quruluşunun təşkilində rolunu müəyyənləşdirmək məqsədi ilə onun hər bir qalıqlının yan zənciri olmayan qlisin ilə tək-tək əvəz etmə yolu ilə 12 analogun konformasiya xüsusiyyətləri tədqiq olunmuşdur. Hər bir analogun optimal konformasiyalarının atomlarının koordinatları, enerji və həndəsi parametrləri hesablanmışdır və bu quruluşları stabilləşdirən qarşılıqlı təsirlərin enerji payına görə ən əhəmiyyətli qalıqlar müəyyən olunmuşdur. Molekulyar dinamika metodu ilə kassininin qlisin ilə əvəz olunmuş 12 analoqlarının konformasiya çevikliyi öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, N-uclu hissədə prolin qalıqlının qlisin ilə əvəz olunması molekulun optimal konformasiyalarının ikigat bucaqlarının dəyişməsinə səbəb olur, lakin C-uclu aktiv pentapeptid hissəsindəki əvəz etmələr əsas zəncirin alfa-spiral quruluşuna bir o qədər kəskin təsir etmirlər. Alınan nəticələr və bioloji testlər əsasında kassinin molekulunun və onun analoqlarının quruluş-funksiya əlaqələri müzakirə edilmişdir.

İŞ 7: ŞİSTOSTATIN NEYROPEPTIDI VƏ ONUN ANALOQLARININ FƏZA QURULUŞUNUN TƏDQIQI

İcraçı: Ağayeva Ü.T.

Hesabat ilində Şistostatin molekulunun fəza quruluşunun tədqiqi davam etdirilmişdir. Bu molekulun aktiv hissəsi kimi güman edilən PheGly-Leu fraqmentinin mükəmməl konformasiya analizi aparılmış, ən kiçik enerjili 3 konformasiyanın kvant-mexaniki hesablanması icra olunmuşdur. Hesablama Volfberg-Helenhols (VH) metodu ilə aparılmışdır. Volfberg-Helenhols (VH) metodu molekulyar orbitallar metodunun sadə yarımempirik variantlarından biridir. Hesab olunur ki, molekulda hər bir elektron nüvələrin və digər elektronların yaratdığı orta effektiv sahədə digər elektronlardan asılı olmadan hərəkət edir. Elektronun halı molekulyar orbital adlanan birelektronlu dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Atom orbitallarından fərqli olaraq molekulyar çox mərkəzli funksiyalar olur. Belə ki, molekulyar orbitalların ifadəsinə elektrondan müxtəlif atom nüvələrinə gədər məsafələr daxil olur. Molekulyar orbitalları qurmaq üçün valent elektronları yaxınlaşmasında MO LCAO metodundan istifadə olunur. Başqa sözlə desək, molekulyar orbitallar molekula daxil olan atomların valent atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılır.

İŞ 8: SAMUR –ATAŞAY ARASI SAHƏNİN MINERAL-TERMAL SULARININ PAYLANMASI, FORMALAŞMASI QANUNUNAUYĞUNLUĞU VƏ SƏMƏRƏLİ İSTİFADƏSİ.

İcraçı: T.Ə.İmamova

Bu iş faktiki materiallarla, xüsusən də geologiya sahəsində respublikamızda ilk dəfə öz əksini tapmış və yüksək səviyyədə tərtib olunmuş yeni xəritələrlə, qrafiklərlə işin məqsədini və qarşıya qoyulan məsələlərin tam həllini özündə əks etdirən elmi nəticələrlə zəngindir. Belə ki, bu region üçün ilk dəfə olaraq mineral və termal su yataqları konkret geoloji strukturlarda öyrənilmiş və onların

formalaşmasında iştirak edən mühüm geoloji faktorlar və proseslər ətraflı şərh edilmişdir. Bundan başqa ilk dəfə olaraq, tədqiq olunan yeraltı suların qaz və duz tərkiblərini tamamilə yeni üsulla işlənmiş və həmin yeraltı suların ion, anion və kation tərkiblərini göstərən bir sıra yeni üçbucaq qrafiklər və bu yeraltı suların ion-duz tərkiblərini göstərən, prof. S.Ə.Bəktəşinin təklif etdiyi üsulla çoxkomponentli diaqramlar tərtib edilmişdir.

İŞ 9: Dİ- VƏ TRİPEPTİD MOLEKULLARIN FƏZA QURULUŞLARININ KVANT-KİMYASI ÜSULLARI İLƏ TƏDQIQI.

İcraçılar: F.H.Paşayev, A.Q.Həsənov

Bəzi bioloji molekulların öyrənilməsi mövzusu üzrə hesabat ili dövründə C₁₉O₄N₄H₂₅(müxtəlif quruluşlu) bioloji molekulunun elektron buludunun paylanması və parsial (effektiv) yüklərin qiymətləri sleyter funksiyaları bazisində hesablanmışdır.

Hesabat dövründə həmçinin asetilaseton molekulunun azotlu törəmələrinin tautomer formalarının (enol-azo, keto-azo və hydro-azo) elektron quruluşu öyrənilmişdir. Hesablamalar MO LCAO metodunun sadə yarımempirik variantı olan Hückel metodunu ilə aparılmışdır. Molekulyar orbitallar π – elektronların atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılmışdır. Hesablamalar nəticəsində bütün tautomer formalar üçün molekulyar orbitalların analitik ifadələri tapılmış, molekulların orbital enerjilərinin, tam elektron enerjisinin qiymətləri, həmçinin molekulda atomların effektiv yüklərinin qiymətləri hesablanmış və molekulyar diaqram qurulmuşdur. Effektiv yüklərin qiymətləri əsasında tautomer formaların reaksiya girmək qabiliyyətləri araşdırılmışdır.

Molekulların elektron quruluşunu öyrənərkən meydana çıxan molekulyar integralların içərisində örtmə integrallarının xüsusi yer tutur. İşdə örtmə integrallarının əhəmiyyəti araşdırılmış və müəyyən edilmişdir ki, onlar üçün alınmış analitik ifadələr və bu ifadələr əsasında tərtib olunmuş kompüter proqramları kvant ədədlərinin istənilən mümkün qiymətlərində yararlıdırlar.

4. DƏRC OLUNMUŞ ELMİ İŞLƏRİN XARAKTERİSTİKASI

4.1. Respublikada dərc olunmuş məqalələr

1. Л.И.Исмаилова Структурно-функциональная связь в кардиоактивных пептидах, миелопептидах и гликопептидах Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с.3-15
2. N.A.Əhmədov, R.M.Abbaslı, E.M.Həsənov Heptapeptid molekulunun nəzəri konformasiya analizi. Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с.49-53
3. N.A.Əhmədov, R.M.Abbaslı, İ.T.Məmmədova, Ş.N.Hacıyeva Ser-Pro-Leu-Gly-Nhr-Met-Arg-Phe-NH₂ molekulunun fəzə quruluşu, Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с.54-57

4. Н.А.Ахмедов, Ш.Н.Гаджиева Пространственная структура молекулы Asp-Pro-Lys-Gln-Asp-Phe-Met-Arg-Phe-NH₂ Вестник БГУ, сер.физ.мат.наук, 2009
5. N.M.Qocayev, L.N.Ağayeva R.M.Abbaslı, L.İ.İsmayılova, N.A.Əhmədov Leu-Arg-Gly-Gln-Pro-Ile-Arg-Phe-NH₂ molekulunun fəza quruluşu. Вестник БГУ, сер.физ.мат.наук, 2009
6. Л.С. Гаджиева, Л.И.Исмаилова Электронно-конформационные свойства молекулы вилон, Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с. 69-75 Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с. 69-75
7. Н.А.Ахмедов, Р.М.Аббаслы, Л.И.Исмаилова Структурно-функциональная взаимосвязь опиоидных пептидов. Journal of Qafqaz University, 2009, №27
8. Г.А.Ахвердиева Конформационные профили D-замещенных аналогов пептида Т. Journal of Qafqaz University, 2009, №27
9. Г.А.Агаева, Пространственное строение нонапептида ламинина. Вестник БГУ, сер.физ.мат.наук, 2009, №1, с.178-188.
- 10.Г.А.Агаева, Р.Э.Алиев, Конформационные свойства молекулы антимикробного пептида тритрптицина, Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с. 101-110.
- 11.G.A.Agaeva, Molecular dynamics studies of tachykinin neuropeptides, Journal of Qafqaz University,2009, N 26, P.
- 12.С.Д.Демухамедова, И.Н.Алиева, Н.М.Годжаев, Н.С.Набиев. Электронное строение молекулы карнозина и его мономерных и димерных комплексов с цинком. Journal of Qafqaz University, 2009, №25, с.114-126
- 13.С.Д. Демухамедова., Study of peptide bond deformation in model dipeptides by the semiempirical quantum chemistry methods, Fizika. 2009, № 3.
- 14.И.Н. Алиева, С.Д. Демухамедова, Н.М. Годжаев. Электронные эффекты в координационных комплексах карнозина с атомом меди. Bakı Universitetinin Xəbərləri (fizika-riyaziyyat elmləri seriyası), 2009, №3, s.163-173
- 15., С.Д.Демухамедова, И.Н. Алиева, З.И.Гаджиев,Н.М. Годжаев Ab initio исследование структуры и колебательного спектра молекулы карнозина. Journal of Qafqaz University, 2009, №27
- 16.İmamova T.Ə. Respublikamızın yeraltı və yerüstü suları, Azərbaycan Texniki Universiteti "Elmi əsərlər-fundamental elmlər", Bakı-2009, № 3, cild 8 (31) s.18-20.
- 17.Ü.T.Ağayeva, L.İ.Vəliyeva. Şistostatin molekullarının son uclu pentapeptid fraqmentlərinin muqaisəli təhlili. Bakı Universitetinin Xəbərləri (fizika-riyaziyyat elmləri seriyası), 2009, №2, s.151-155
- 18.Т.И.Исмаилова., Р.М.Аббаслы., Л.И.Исмаилова Динамические свойства гептапептидной молекулы., Fizikanın Müasir Problemləri, III Respublika Elmi konfransı, 2009, Bakı.

19. N.A. Əhmədov, R.M. Abbaslı, L.İ. İsmayılova, E.M. Həsənov PRO-MET-SER-MET və MET-LEU-ARG-LEU-NH₂ tetrapeptid fraqmentlərinin konformasiya analizi, Fizikanın Müasir Problemləri, III Respublika Elmi konfransı, 2009, Bakı.
20. Ş.N. Hacıyeva, N.F. Əhmədov, N.A. Əhmədov SER-VAL-GLN-ASP-ASN Penta peptid raqmentinin konformasiya analizi, Fizikanın Müasir Problemləri, III Respublika Elmi konfransı, 2009, Bakı.
21. G.Ə. Haqverdiyeva. Opioid peptidlərinin fəza quruluşlarının kompyuter modelləşdirilməsi. «Fizikanın müasir problemləri» III Respublika Elmi konfransı.
22. Г.А. Агаева, Исследование конформационного поведения аналогов молекулы кассинина. III Respublika Konfransının Materialları, 15-16 dekabr 2009 il.
23. С.Д. Демухамедова, З.И. Гаджиев, И.Н. Алиева. “Моделирование и ab initio исследование структуры и колебательного спектра молекулы карнозина”, «Fizikanın müasir problemləri» III Respublika elmi konfransı, Bakı, 2009.
24. Q.Q. Məmmədov, M.Ə. Ramazanov, V.H. Bədəlov, C.Ə. Nağıyev, A.Ə. Mehdiyeva, M.M. Bəkirova Abşeron yarımadasında təbii və antropogen radionuklidlərlə çirklənmiş ərazilərin tədqiqi «Fizikanın müasir problemləri» III Respublika Elmi konfransı, Bakı, 2009.

4.2 Xaricdə dərc olunmuş məqalələr

1. N.A. Axmedov, R.M. Abbasly, L.I. Ismailova Пространственная структура кардиоактивных пептидов. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AICT 2009, 14-16 October 2009.
2. Т.И. Исмаилова, Р.М. Аббаслы, Л.И. Исмаилова Пространственная структура и электронные свойства молекулы Gly-Glu-His-Phe-Pro-Gly-Pro-NH₂. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AICT 2009, 14-16 October 2009.
3. G.A. Akverdieva, N.M. Godjayevev, S. Akyuz. Comparative conformational analysis of peptide T analogs. Journal of Molecular Structure, v. 917, 2009, pp. 22-26.
4. Ə.M. Nəbiyev, G.Ə. Haqverdiyeva Hemorfin peptidlərinin fəza quruluşlarının tədqiqi. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AICT 2009, 14-16 October 2009.
5. G.A. Agaeva, Conformational aspects of structure-function relationships in biology active peptides. The 3rd International Conference on Application of

Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 oktyabr, 2009, Bakı, s.

6. С.Д.Демухамедова Роль компьютерного моделирования в спектроскопических и квантовохимических исследованиях структуры и свойств многоатомных молекул. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 October 2009, pp.99-104
7. С.Д.Демухамедова, И.Н.Алиева, Н.М.Годжаев Влияние атомов переходных металлов на структуру координационных комплексов карнозина. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 October 2009, pp.105-108
8. И.Н.Алиева, Г.Аббасова, Н.М.Годжаев Конформационно-динамические свойства молекулы СРЕКА The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 October 2009
9. F.N.Paşayev, A.Q.Nəsənov Atom və molekullrain elektron quruluşunun öyrənilməsində örtmə inteqrallarının rolu. The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 October 2009.
10. P.A.Aliyeva, F.G.Pashaev, A.G.Gasanov, K.T.Maxmudov. Квантово-химические расчеты таутомерных форм азопроизводных ацетилацетона и их определение констант устойчивости их комплексов с РЗЭ. Координационная химия, 2009, том 35, №3, с.245–250, Россия.
11. У.Т.Агаева Компьютерное моделирование пространственной структуры молекулы Phe-Gly-Leu-NH₂ The 3rd International Conference on Application of Information and Communication Technologies, AİCT 2009, 14-16 October 2009.

4.3 Xaricdə dərc olunmuş tezislər

1. Н.А.Ахмедов, Л.Н.Ахмедова, Ш.Н.Гаджиева, Р.М.Аббаслы, Л.И.Исмаилова Молекулярное моделирование кардиоактивных пептидов: Тезисы докладов VI Всероссийская конференция «Молекулярное моделирование», 2009, 8-10 апреля, Москва, с.47
2. Н.А.Ахмедов, Л.Н.Агаева, Р.М.Аббаслы, Л.И.Исмаилова Структурная организация кардиоактивных пептидов. Тезисы Всероссийской конференции «Химическая биология, фундаментальные проблемы бионанотехнологии», 2009, 10-14 июня, Новосибирск, с.110
3. Т.И.Исмаилова, Л.И.Исмаилова Конформационные свойства молекулы Семакс и ее аналогов. Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinə Nəsr olunmuş Beynəlxalq elmi konfrans, Bakı, 2009, s.188-189

4. N.A.Əhmədov, L.İ.İsmayılova, R.M.Abbaslı, E.M.Həsənov, L.N.Ağayeva Kardiofəal oktapeptid molekulunun fəzə quruluşu. Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinə Həsər olunmuş Beynəlxalq elmi konfrans, Bakı, 2009, s.191-192
5. R.M.Abbaslı, Ş.N.Hacıyeva, E.M.Həsənov, N.A.Əhmədov Ser-Pro-Leu-Gly-Thr-Met-Arg-Phe-NH₂ molekulunun yan zəncirlərinin konformasiya imkanları. Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinə Həsər olunmuş Beynəlxalq elmi konfrans, Bakı, 2009, s.193-194
6. P.M.Аббаслы, Ш.Н.Гаджиева, Л.Н.Агаева, Н.А.Ахмедов Трёхмерное строение кардиоактивных пептидов. Международная конференция «Рентгеновское, синхронное излучения, нейроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии», РСНЭ-НБИК, Москва, 2009
7. Л.И.Исмаилова, Т.И.Исмаилова, Н.М.Годжаев Пространственная структура гептапептидной молекулы. Международная конференция «Рентгеновское, синхронное излучения, нейроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии», РСНЭ-НБИС, Москва, 2009
8. Г.А Ахвердиева, А.М. Набиев, Н.М.Годжаев Теоретический подход к моделированию биологически активных конформаций геморфинов, 6-я Всероссийская конференция "Молекулярное моделирование", 8-10 апреля 2009 г., Москва, стр 46.
9. Г.А.Ахвердиева, А.М.Набиев, Н.М.Годжаев. Конформационные особенности пептидов из семейства геморфинов. Научная конференция «Химическая биология-Фундаментальные проблемы бионанотехнологии», 10-14 июня 2009 г., Новосибирск, стр.109
10. Г.А.Ахвердиева. Электронные характеристики пептида Т. VII Национальная Конференция "Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нанобиоинфо-когнитивные технологии". РСНЭ–НБИК, 2009
11. Г.А.Ахвердиева Структурно-функциональная организация опиоидных пептидов. Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinəhəsər olunmuş Beynəlxalq elmi konfransın materialları, 30-31 oktyabr 2009-cu il, Bakı, s. 169-171.
12. Ə.M.Nəbiyev, G.Ə.Naqverdiyeva, N.M.Qocayev. Hemorfin peptidlərinin fəza quruluşlarınınin nəzəri modelləşdirilməsi. Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinəhəsər olunmuş Beynəlxalq elmi konfransın materialları, 30-31 oktyabr 2009-cu il, Bakı, s.171-172
13. Г.А.Агаева, Конформационное поведение тахикининового нейропептида кассинина и его модифицированных аналогов, 6-я Всероссийская конференция «Молекулярное моделирование» , 8-10 апреля 2009 г.Москва с. 43.

14. Г.А.Агаева, Р.Э.Алиев Структурная организация антимикробного пептида тритрптицина. Сборник трудов научной конференции «Химическая биология-фундаментальные проблемы бионанотехнологии», 10-14 июня 2009 г.,Новосибирск, с.108.
15. Р.Э.Алиев, Г.А.Агаева, Пространственная структура антибактериального пептида индолицидина. Сборник трудов научной конференции «Химическая биология-фундаментальные проблемы бионанотехнологии», 10-14 июня 2009 г., Новосибирск, с.109.
16. Г.А.Агаева, Р.Э.Алиев, Конформационно-динамические особенности фрагмента остеокальцина (7-19) биомаркера костного метаболизма.,IV Российский симпозиум «Белки и пептиды» , Тезисы докладов , Казань, 23-27 июня 2009 г., с.160.
17. Г.А.Агаева, Н.М.Годжаев, Пространственная организация тахикининовых пептидов амфибий и их монозамещенных аналогов. IV Российский симпозиум «Белки и пептиды», Тезисы докладов, Казань, 23-27 июня 2009 г., с.161.
18. Г.А.Агаева, Пространственное и электронное строение циклических дипептидов с антимикробной активностью Материалы VII Национальной конференции (РСНЭ-НБИК 2009),Москва, 16-21 ноября 2009 г.
19. Г.А.Агаева, Н.М.Годжаев Сравнительный конформационный анализ молекул кассинина и энтерокассинина. Материалы Международной научной конференции, посвященный 90-летию Бакинского Государственного Университета (Естественные науки), 30-31 октября 2009 года, с.184-186
20. Г.А.Агаева, Пространственная организация пептидных молекул и их глицин-монозамещенных аналогов. Материалы Международной научной конференции, посвященный 90-летию Бакинского Государственного Университета (Естественные науки) , 30-31 октября 2009 года, с.186-187.
21. С.Д.Демухамедова, З.И.Гаджиев, И.Н.Алиева. Исследование электронной структуры и колебательного спектра двух таутомерных форм молекулы карнозина. BDU-nun 90 illik yubileyinə həsr olunmuş Beynəlxalq Elmi Konfrans, Bakı, 2009, s.189-191
22. С . Д.Демухамедова, З.И.Гаджиев. Моделирование колебательных спектров молекулы карнозина и его комплексов с цинком. Материалы 6-й Всероссийской конференции «Молекулярное моделирование», Москва, 2009, с.66
23. Л.И.Велиева, И.Н.Алиева, М.А.Мусаев. Компьютерное моделирование как основа для создания природных инсектицидов Материалы 6-й Всероссийской конференции «Молекулярное моделирование», Москва, 2009, с.22
24. С.Д.Демухамедова, Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Моделирование пространственной структуры таутомерных форм карнозина, анзерина и

- гомокарнозина и их комплексов с цинком. Материалы 6-й Всероссийской конференции «Молекулярное моделирование», Москва, 2009, с.65
25. С.Д.Демухамедова, Гаджиев З.И., Алиева И.Н. Пространственная и электронная структура и колебательный анализ молекулы карнозина. Сб.трудов научной конференции “Химическая биология – Фундаментальные проблемы бионанотехнологии”. Новосибирск, 10-14 июня, 2009, с.112.
 26. Алиева И.Н., Демухамедова С.Д., Аббасова Г.Д., Курбанов И.С., Годжаев Н.М. Структура координационных комплексов пептидных молекул с переходными металлами. IV Российский Симпозиум Белки и пептиды, Казань, 23-27 июня 2009, с.162
 27. С.Д.Демухамедова. Квантовохимическое исследование комплексов карнозина с медью. На конф. VII национальная конференция “Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии”. РСНЭ-НБИК 2009
 28. Л.И.Велиева, У.Т.Агаева, Н.М.Годжаев Молекулярное моделирование нейропептида шистостатина-10. Материалы 6-й Всероссийской конференции «Молекулярное моделирование», Москва, 2009, с.59
 29. Ü.T.Ağayeva, L.İ.Vəliyeva Kompüter modelləşdirilməsi ilə shistostatin 8 və allatostatin 7 neuropeptidinin tədqiqi. BDU-nun 90 illik yubileyinə həsr olunmuş Beynəlxalq Elmi Konfrans, Bakı, 2009, s.196-197.
 30. Д.М.Кули-Заде, А.Г.Гасанов. Математическое моделирование и компьютерное вычисление параметров асимметрии профилей спектральных линий. Материалы Межд.науч.конф., посв., 90-летию БГУ, стр. 152-153, Баку 30-31 октября 2009.
 31. R.A Aliyeva, F.H.Pashaev, A.G.Gasanov, S.I Azimova, K.T.Mahmudov. The thermodynamic characteristics of complex formation of some metals with 3-(4-nitrophenylazo)pentan-2,4-dione in aqueous ethanol solution. «The XVII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia», (RCCT 2009), 29 June-3 July, 2009, Kazan, Russia.

5. XARICI DÖVLƏTLƏRİN TƏHSİL VƏ ELMİ MÜƏSSISƏLƏRİ İLƏ ƏLAQƏLƏR

5.1 Nəzəri fizika şöbəsinin əməkdaşları MDU–nin biologiya fakültəsinin biofizika kafedrası, REA –nın Molekulyar biologiya, Bioüzvi kimya, Geokimya və analitik kimya institutları, Türkiyənin İstanbul və Erciyez Universitetləri və AMEA –nın Radiasiya Problemləri İnstitutu ilə əməkdaşlıq etmişlər.

Nəzəri fizika şöbəsinin əməkdaşları: b.e.i. Əhmədov N.A., a.e.i. İsmayılova L.İ., b.e.i. Abbaslı R.M. Rusiya Elmlər Akademiyasının M.M.Şemyakin

və Yu.A.Ovçinnikov adına Bioüzvikimya İnstitutunun yaradılmasının 50 illik yubiley tədbirlərində iştirak etmişlər.

5.2 Rusiya Elmlər Akademiyasının Yüksəkmolekullu Birləşmələr İnstitutunun laboratoriya müdiri YUNESKO mükafatı laureatı prof. T.M.Birşteyn Bakı Dövlət Universitetinin Fizika Problemləri ETİ-nun Nəzəri Fizika şöbəsində elmi məzuniyyətdə olmuşdur. Prof. T.M.Birşteyn Molekulyar biofizika laboratoriyasında aparılan elmi-tədqiqat işləri ilə tanış olmuş, institutun seminarında elmi məruzə ilə çıxış etmişdir.

8. FAKÜLTƏDƏ KEÇİRILMIŞ ELMİ KONFRANSLARIN, SEMINARLARIN, SIMPOZIUMLARIN XARAKTERISTİKASI

Şöbədə “Bioloji proseslərin molekulyar təşkilinin tədqiqi” mövzusunda seminarlar fəaliyyət göstərir. Seminarların rəhbəri f.r.e.d., prof. N.M.Qocayevdir.

2009-cı ildə şöbənin əməkdaşları Bakı Dövlət Universitetinin 90 illik yubileyinə həsr olunmuş Beynəlxalq elmi konfransda, Fizikanın Müasir Problemləri, III Respublika Elmi konfransda, İnformasiya-kommunikasiya texnologiyalarının AİCT 2009, III Beynəlxalq konfransda, VI Всероссийская конференция «Молекулярное моделирование», (Москва), Всероссийская конференция «Химическая биология, фундаментальные проблемы бионанотехнологии», (Новосибирск), IV Российский симпозиум «Белки и пептиды» (Казань) iştirak etmişlər. Təqdim olunan materiallar məqalələr və tezislər şəklində çap olunmuşdur.

9. FAKÜLTƏDƏ ELMİ VƏ ELMİ-PEDAQOJI KADRLARIN HAZIRLANMASI

Şöbənin əməkdaşları: prof. N.M.Qocayev fizika fakültəsinin bakalavr və magistrantları üçün ümumi fizika kursundan və ixtisas kursların mühazirələr oxumuşdur. prof. N.A.Əhmədov fizika fakültəsinin bakalavrlarının buraxılış və kurs işlərinə rəhbərlik etmişdir.

Şöbənin əməkdaşları prof. N.A.Əhmədov və prof. İ.N.Əliyeva Azərbaycan Respublikası Təhsil Nazirliyinin elmi-metodik şurasının fizika bölməsinin üzvləridir.

10. DISSERTASIYA MÜDAFİƏSİ VƏ DISSERTASIYA ŞURALARININ FƏALİYYƏTİ

Şöbənin əməkdaşları prof. N.M.Qocayev, b.e.d. İ.N.Əliyeva fizika fakültəsində fəaliyyət göstərən dissertasiya şurasının üzvləridirlər. Bundan başqa şöbənin bir neçə əməkdaşı Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında AAK-nın təşkil etdiyi birdəfəlik müdafiə şuralarında iştirak etmişlər.

Şöbənin baş elmi işçisi N.A.Əhmədov Azərbaycan Respublikası Prezidenti yanında AAK-nın ekspertidir.

11. TƏLƏBƏLƏRİN VƏ GƏNC TƏDQIQATÇILARIN (MAGISTR LƏRİN) ELMİ-TƏDQIQAT İŞLƏRİ (KONFRANSDA İŞTIRAKI)

“Nəzəri fizika” şöbəsinin əməkdaşları tələbələrin kurs və buraxılış işlərinə magistrlərin dissertasiya işlərinə rəhbərlik etmişlər. Prof. N.Qocayevin magistri İ.Məmmədova şöbədə elmi-tədqiqat işləri aparmış və aldığı nəticələr “Journal of Qafqaz University” jurnalında məqalə şəklində dərc olunmuşdur.

12. ƏSAS NƏTİCƏLƏR VƏ TƏKLİFLƏR

Hesabat dövründə Nəzəri fizika şöbəsinin Molekulyar biofizika laboratoriyasının əməkdaşları tərəfindən nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə maymodulinlər fəsiləsinə daxil olan molekulların, nootrop və neyroprotektor xassəli peptid molekullarının, opioid peptidləri fəsiləsinə daxil olan peptid T və hemorfin molekulların fəza quruluşları tədqiq olunmuşdur. Taxikinin neyropeptidlər fəsiləsinə aid olan kassinin molekulun analoqlarının konformasiya imkanları molekulyar mexanika və molekulyar dinamika üsulları ilə öyrənilmişdir. Şistostatin molekulunun Phe-Gly-Leu fraqmentinin müxtəlif metodlarla quruluşu öyrənilmişdir. Karnozin molekulunun sink və mis metalları ilə kompleksinin elektron və fəza quruluşu PM3 yarımempirik kvant kimyası üsulu ilə öyrənilmişdir. HyperChem proqramm paketinə daxil olan polimer proqramm mənimsənilmiş və 10 (on) monomerdən ibarət karnozin-sink kompleksinin polimerinin modeli yaradılmışdır. Asetilaseton molekulunun azotlu törəmələrinin tautomer formalarının (enol-azo, keto-azo və hydro-azo) elektron quruluşu öyrənilmişdir.