

УДК 547.962:541.63

**ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА
НЕЙРОПЕПТИДА DIPPU AST1****Л.И.ВЕЛИЕВА, И.Н.АЛИЕВА***Бакинский Государственный Университет*
Lala_Velieva@rambler.ru

Методом теоретического конформационного анализа установлена пространственная структура нейропептида Dippu Ast1, принадлежащего семейству аллатостатинов. На основе расчёта величины внутримолекулярной конформационной энергии проведена количественная оценка стабильности возможных конформационных состояний молекулы в условиях полярной среды.

Ключевые слова: нейропептиды, структура, конформационный анализ.

Аллатостатины образуют семейство биологически активных нейропептидов, которые играют ключевую роль в регуляции процессов синтеза и выделения ювенильных гормонов у различных видов насекомых [1-4]. Важную роль в реализации функций аллатостатинов играют их конформационные свойства и трехмерная пространственная организация, изучение которых необходимо для понимания механизмов функционирования нейропептидов на молекулярном уровне. В данной работе методом теоретического конформационного анализа на основе поэтапного подхода, описанного в работах [5,6] проведено исследование структуры и конформационной динамики молекулы Dippu Ast1. Первичная структура молекулы, предложенная в работе [4], является линейной последовательностью шести аминокислотных остатков **Leu1-Tyr2-Asp3-Phe4-Gly5-Leu6-NH₂ (LYDFGL)**. В химической структуре молекулы содержатся как гидрофобные (Tyr, Phe), так и гидрофильные остатки. Известно также, что в N-ацетил-L-фенилаланине с ароматической боковой цепью пространственные формы основной и боковой цепей взаимосвязаны; каждой форме основной цепи соответствуют вполне определенные энергетически выгодные положения заместителя. Схема поэтапного расчета фрагментов Leu1-Tyr2-Asp3, Phe4-Gly5-Leu6, тетрапептидного фрагмента Leu1-Tyr2-

Asp3-Phe4, перекрывающегося по остатку фенилаланина, и наконец, всей молекулы аллатостатина DipruAST1 приведена на рис. 1.

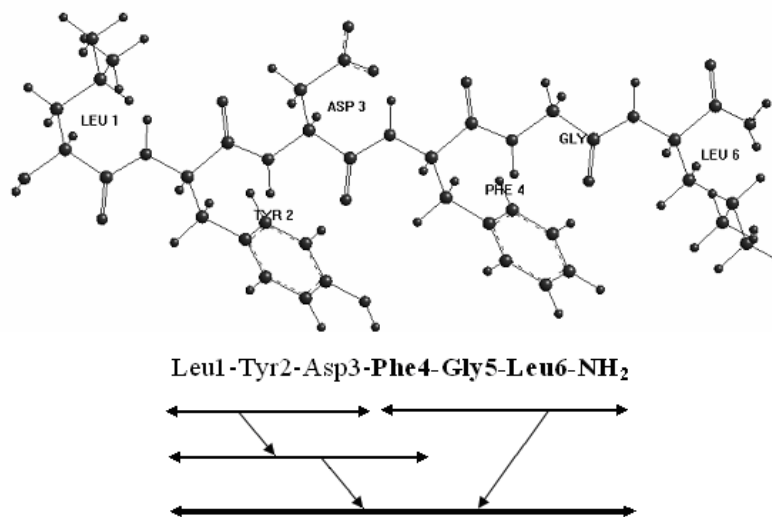


Рис.1. Схема расчета молекулы аллатостатина Dipru AST1

Метод и результаты расчета

Моделирование структуры молекул проводилось методом теоретического конформационного анализа с учетом полярного окружения атомов на основе пакета прикладных компьютерных программ [8]. Используемые в работе полуэмпирические потенциальные функции и их параметризация были взяты из работы [7,8].

Как видно из рис.1 расчет проводился поэтапно. Трипептидный фрагмент Leu1-Tyr2-Asp3 включает 58 атомов и 19 двугранных углов вращения. Формы остатков определялись низкоэнергетическими областями В, R и L двугранных углов основной цепи ϕ и ψ каждого монопептида. При расчете были рассмотрены все развернутые формы и свернутые формы основной цепи остатков с различными значениями двугранных углов в их боковых цепях ($\chi=60, 180$ и -60°). Лишь для лейцина были учтены R и B формы, так как для первого остатка В и L формы являются изоэнергетичными. Угол χ_1 боковой цепи Tyr2 может принимать два значения $\pm 90^\circ$, оба из которых были учтены при составлении набора стартовых структур.

Всего было составлено 486 начальных вариантов для процедуры минимизации полной конформационной энергии, включающей вклады невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий, а также энергию образования водородных связей.

Как следует из результатов исследования (табл.1) в интервал с относительной энергией 0-3 ккал/моль попадают представители трех из четырех возможных шейпов fe, ef и ff. Наибольшее число низкоэнергетических конформационных состояний принадлежит к структурам полностью свернутого типа (шейп ff). В интервал с относительной энергией 0-2

ккал/моль попадает 8 конформаций этого шейпа, которые отличаются, в основном, значениями двугранных углов в боковых цепях остатков Leu1 и Tyr2. Энергетически наиболее устойчивой является конформация из этого шейпа с R₃R₁R₁ формой основной цепи (E_{полн}=-9,91 ккал/моль), которая предпочтительна не только по энергии невалентных взаимодействий (E_{нев}=-14.09 ккал/моль), но и по вкладу от электростатических взаимодействий (E_{эл}=2.72 ккал/моль) (табл.1). Всего на 1.51 и 2.85 ккал/моль, соответственно, отличаются низкоэнергетические конформации двух других шейпов ef и fe, поэтому все их представители были включены в процедуру расчета последующих фрагментов молекулы.

Таблица 1

Низкоэнергетические конформационные состояния фрагментов и всей молекулы аллатостатина D₁pru AST1

Шейп	Конформация	Вклады энергии, ккал/моль				
		E _{нев}	E _{эл}	E _{торс}	E _{полн}	E _{отн}
Leu1-Tyr2-Asp3						
<i>ff</i>	R ₃ R ₁ R ₁	-14.09	2.72	1.46	-9.91	0.00
	R ₃ R ₁ R ₃	-14.00	3.16	2.24	-8.59	1.32
	R ₂ R ₁ R ₁	-12.69	3.05	1.74	-7.89	2.02
	R ₂ R ₃ R ₁	-12.29	3.29	1.94	-7.06	2.85
	R ₂ R ₃ B ₁	-12.14	3.18	1.83	-7.13	2.89
<i>ef</i>	B ₃ R ₁ R ₁	-13.31	3.21	1.70	-8.40	1.51
	B ₃ R ₁ B ₁	-11.81	3.42	1.31	-7.08	2.83
<i>fe</i>	R ₃ B ₁ R ₁	-11.48	3.44	0.99	-7.06	2.85
Leu1-Tyr2-Asp3-Phe4						
<i>fff</i>	R ₃ R ₁ B ₁ R ₃	-19.80	5.55	2.95	-11.30	0.00
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₃	-19.42	6.23	2.24	-10.96	0.34
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₂	-17.13	6.09	2.15	-8.89	2.41
	R ₃ R ₁ R ₃ B ₁	-17.70	6.78	2.16	-8.76	2.54
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₃	-16.96	6.13	2.23	-8.59	2.71
	R ₃ R ₁ R ₁ R ₂	-16.46	5.95	2.05	-8.46	2.84
<i>ffe</i>	R ₃ R ₁ B ₁ B ₃	-18.50	6.46	1.76	-10.28	1.02
	R ₃ R ₁ B ₁ R ₃	-18.24	6.55	1.65	-10.05	1.25
	R ₃ R ₁ R ₁ L ₃	-17.99	5.83	2.23	-9.94	1.36
	R ₃ R ₁ R ₃ L ₃	-19.83	6.42	3.80	-9.62	1.68
	R ₂ R ₁ B ₁ B ₃	-18.29	6.42	2.65	-9.22	2.08
	R ₂ R ₁ B ₁ R ₃	-17.69	6.48	2.15	-9.06	2.24
	R ₂ R ₃ B ₁ R ₃	-17.38	6.53	1.97	-8.88	2.42
	R ₂ R ₃ B ₁ B ₃	-17.39	6.55	2.18	-8.66	2.64
<i>efe</i>	R ₂ R ₁ R ₁ L ₃	-17.33	5.96	2.71	-8.65	2.65
	B ₃ R ₁ R ₁ L ₃	-18.09	6.16	2.63	-9.31	1.29
	B ₃ R ₁ B ₁ B ₃	-17.33	6.82	1.92	-8.59	2.71
<i>eef</i>	B ₃ R ₁ B ₁ R ₃	-16.89	6.82	1.62	-8.45	2.85
	B ₃ R ₁ R ₁ B ₁	-19.92	6.37	4.22	-9.33	1.97
<i>eff</i>	B ₃ R ₁ R ₁ R ₂	-16.92	6.16	1.72	-9.04	2.26
	B ₃ R ₁ R ₁ B ₂	-16.69	6.48	1.95	-8.26	3.04
	B ₃ R ₁ R ₁ R ₃	-17.49	6.44	2.93	-8.12	3.18

Phe4-Gly5-Leu6						
<i>fe</i>	R ₂ BR ₃	-11.8	1.4	1.0	-9.5	0.0
<i>ee</i>	B ₂ BR ₃	-11.7	1.3	1.4	-9.0	0.5
<i>ff</i>	B ₂ PR ₃	-11.8	1.2	1.7	-8.7	0.8
<i>ef</i>	R ₁ PL ₃	-11.7	1.4	1.6	-8.6	0.9
Dippu AST1						
<i>ffefe</i>	R ₃ R ₁ B ₁ R ₃ BR ₃	-23.00	5.95	3.06	-13.99	0.00
	R ₃ R ₁ B ₁ R ₃ BB ₃	-22.70	6.70	3.29	-12.71	1.28
<i>ffff</i>	R ₃ R ₁ R ₁ B ₂ PR ₃	-21.87	5.25	3.14	-13.48	0.51
	R ₃ R ₁ R ₃ B ₂ PR ₃	-19.74	5.64	3.73	-10.36	3.63
	R ₃ R ₁ B ₁ L ₃ PR ₃	-18.12	7.02	5.25	-5.85	7.14
<i>ffeff</i>	R ₃ R ₁ R ₁ L ₃ PR ₃	-21.95	5.63	3.17	-13.15	0.84
	R ₃ R ₁ R ₃ L ₃ PR ₃	-24.45	6.18	5.32	-12.95	1.04
<i>effff</i>	R ₂ R ₁ R ₁ L ₃ PR ₃	-21.12	5.70	3.63	-11.79	2.20
	B ₃ R ₁ R ₁ B ₂ PR ₃	-20.83	5.42	3.48	-11.93	2.06
<i>efeff</i>	B ₃ R ₁ R ₁ L ₃ PR ₃	-21.23	5.97	3.53	-11.73	2.26
<i>fffee</i>	R ₃ R ₁ R ₃ B ₃ BR ₃	-21.28	6.40	3.33	-11.55	2.44
	R ₃ R ₁ R ₃ B ₃ BB ₃	-21.04	6.61	3.42	-11.01	2.98
<i>ffffe</i>	R ₃ R ₁ R ₃ R ₃ BB ₃	-23.03	6.29	5.39	-11.36	2.63
	R ₂ R ₁ R ₁ R ₃ BR ₃	-21.80	6.36	4.22	-11.22	2.77
	R ₃ R ₁ R ₃ B ₁ PL ₃	-20.89	6.60	3.73	-10.56	3.43
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₂ BB ₃	-20.47	6.10	3.98	-10.39	3.60
	R ₃ R ₁ R ₃ B ₁ LR ₃	-20.69	7.01	3.54	-10.14	3.85
<i>ffeee</i>	R ₃ R ₁ R ₁ L ₃ BR ₃	-20.23	5.54	3.63	-11.05	2.94
	R ₃ R ₁ R ₃ L ₃ BR ₃	-22.02	6.06	4.97	-10.99	3.00
	R ₃ R ₁ R ₁ L ₃ BB ₃	-20.28	5.69	3.73	-10.85	3.14
<i>fffef</i>	R ₃ R ₁ R ₁ R ₂ PB ₃	-19.50	5.84	2.98	-10.68	3.31
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₂ PB ₃	-19.41	6.07	3.68	-9.66	4.33
<i>fffee</i>	R ₃ R ₁ B ₁ L ₃ BR ₃	-18.11	6.13	3.07	-8.91	5.08
	R ₃ R ₁ B ₁ L ₃ BB ₃	-18.18	6.40	3.29	-8.49	5.50
<i>fefee</i>	R ₃ B ₁ R ₁ B ₃ BB ₃	-18.12	6.49	4.30	-7.34	5.65
	R ₃ B ₁ R ₁ B ₃ BR ₃	-17.99	6.27	4.12	-7.59	5.40
<i>effef</i>	B ₃ R ₁ R ₁ R ₂ PB ₃	-16.57	6.14	3.52	-6.92	7.07
<i>fffef</i>	R ₃ R ₁ R ₃ R ₁ PB ₃	-16.33	6.13	3.49	-6.71	7.28
	R ₃ R ₁ R ₃ R ₁ PR ₃	-16.40	5.95	3.70	-6.75	7.24
<i>fffef</i>	R ₃ R ₁ B ₁ R ₂ PB ₃	-15.09	6.38	2.31	-6.40	7.59

Полученные данные были положены в основу расчета тетрапептидного фрагмента Leu1-Tyr2-Asp3-Phe4 молекулы аллатостатина Dippu AST1, содержащего 78 атомов и 24 двугранных угла вращения. Всего было составлено 90 вариантов для процедуры минимизации конформационной энергии, которые включали низкоэнергетические конформации трипептидного фрагмента и монопептида N-ацетил-L-фенилаланина с варьируемыми значениями углов в их боковых цепях. Согласно результатам расчета, не наблюдается существенной дифференциации ни по шейпам, ни по формам основной цепи. Так в интервал относительной энергии 0-3 ккал/моль попадают 29 конформаций, принадлежащих 5 шейпам, а в интервал 0-5 ккал/моль входят уже 55 конформаций всех 8 допустимых шейпов тетрапептида (таб.1).

Как следует из результатов расчета, энергетически наиболее предпочтительными являются конформации, принадлежащие шейпу *fff* и характеризующиеся $R_3R_1V_1R_3$ формой основной цепи. Они стабилизированы, в основном, невалентными взаимодействиями сближенных атомов ароматических боковых цепей остатков тирозина и фенилаланина. Вклад от энергии невалентных взаимодействий во всех низкоэнергетических структурах приблизительно одинаков и варьирует в пределах $-16.1 \div 19.8$ ккал/моль. Всего на 1.02, 1.29, 1.97 и 2.26 ккал/моль отличаются низкоэнергетические представители других шейпов *ffe*, *e fe*, *e ef* и *eff*, соответственно. В процедуру последующего расчета были включены представители всех типов структур.

Специфика трипептидного фрагмента Phe4-Gly5-Leu6-NH₂, идентичного для всех аллатостатинов исследуемого семейства определяется большой конформационной свободой центрального остатка Gly5 и тенденцией к образованию выгодных контактов с подвижными и объемными боковыми цепями Phe4 и Leu6. Исключение составляет конформация с $\chi_1 = 180^\circ$ в боковой цепи Leu6, в которой боковая цепь расположена в сторону от пептидной цепи и не участвует в образовании эффективных контактов. Конформации с R или V формами основной цепи конечного остатка Leu6 с $\psi = -60^\circ$ (R-форма) и $\psi = +120^\circ$ (V-форма) практически изоэнергетичны, поэтому в расчетах была учтена только одна из них, а именно R форма пептидной цепи.

Основная цепь остатка Phe4 может находиться в R, V и L формах. Для его боковой цепи были учтены состояния с $\chi_1 = \pm 60, 180^\circ$ и $\chi_2 = 90^\circ$. Для минимизации энергии были составлены 81 стартовых конформаций при варьировании 15 двугранных углов ϕ , ψ , ω и χ . Энергетически более предпочтительны представители шейпа *fe*, который содержит наибольшее число конформаций с $E_{отн} = 0-3$ ккал/моль (37% от общего числа конформаций, табл.2). Глобальная конформация стабилизирована вкладами как невалентных, так и электростатических взаимодействий.

Таблица 2

Энергетическое распределение оптимальных конформаций трипептидного фрагмента Phe4-Gly5-Leu6 молекулы аллатостатина Dipru AST1

Шейп	Интервал относительной энергии, ккал/моль			Процентное соотношение конформаций
	0÷1	1÷2	2÷3	
<i>fe</i>	6*	9	-	37,5 %
<i>ee</i>	4	-	6	25,0 %
<i>ef</i>	2	2	4	20,0 %
<i>ff</i>	1*	-	6	17,5 %

Конформации с: 1-полусвернутой формой; 2-развернутой формой; 3-свернутой формой остова

Примечание: *-число конформаций

Проанализируем конформации с полностью вытянутой (B_2BR_3 , шейп ee) и полусвернутой формами основной цепи (R_2BR_3 , шейп fe и R_1PL_3 , шейп ef). В конформации B_2BR_3 взаимодействие между первым остатком (Phe4) и третьим остатком (Leu6) несущественно. Взаимодействия между соседними остатками (первым со вторым и второго с третьим) вносят практически одинаковый вклад, равный приблизительно -2,2 ккал/моль. Однако трипептидные взаимодействия не вносят дополнительного вклада в стабилизацию рассчитанных структур. В конформациях с полусвернутыми формами основной цепи (R_2BR_3 и R_1PL_3) появляются дополнительные взаимодействия между боковыми цепями остатков Phe4 и Leu6 (порядка -3,8 ккал/моль).

Конформация с наименьшим значением полной энергии (R_2BR_3) или глобальная конформация трипептида предпочтительна также в отношении энтропии, так как представлена большим числом низкоэнергетических конформаций данного шейпа. В этой структуре боковая цепь остатка Leu6 (с $\chi_1 = -51^\circ$, $\chi_2 = 177^\circ$, $\chi_3 = 186^\circ$, и $\chi_4 = 180^\circ$) нависает над остатком Phe4 (с $\chi_1 = 180^\circ$ и $\chi_2 = 90^\circ$), внося дополнительный вклад порядка -4,1 ккал/моль. При $\chi_1 = 60^\circ$ и 180° в боковой цепи Leu6 отсутствуют какие-либо стабилизирующие вклады в полную энергию молекулы. Противоположная ситуация возникает в свернутых структурах трипептидного фрагмента B_2PR_3 , в которых боковые цепи первого и третьего остатков ориентированы в противоположные стороны, однако элементы основной цепи и боковые цепи соседних остатков эффективно взаимодействуют. Все остальные конформации высокоэнергетичны и не включены в последующую схему расчета.

На промежуточных стадиях расчета при рассмотрении конформационных возможностей сравнительно небольших фрагментов относительная величина общей энергии, как бы разумно велик не был, критический интервал ее изменений далеко не в полной мере может служить надежным критерием отбора перспективных структурных вариантов. Рассчитываемые конформационные состояния фрагмента, принадлежащие различным формам и шейпам, весьма не равноценны в этом отношении, и поэтому сопоставление величин их внутренней энергии без анализа соответствующих матриц межостаточных взаимодействий вряд ли является разумным.

Молекула аллатостатина Dippu AST1. Полученные на предыдущих этапах результаты расчета были положены в основу расчета всей молекулы аллатостатина Dippu AST1. Как следует из результатов расчетов (табл.3-4 и рис.1), наибольшее число низкоэнергетических конформационных состояний ($E_{отн} = 0-5$ ккал/моль) содержат шейпы ffff (7 конформаций), ffee (5 конформаций) и ffee (9 конформаций). Жесткой структурой пептидного остова, однако, обладают конформации, имеющие полно-

стью свернутые (ffffff) и полусвернутые (ffefe, ffeff) формы. Характерной особенностью рассчитанных структур является наличие конформационно жесткого участка на фрагменте Leu1-Тур2-Asp3 (рис.2).

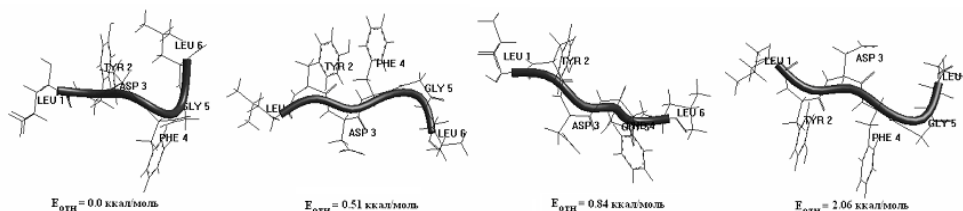


Рис.2. Низкоэнергетические конформационные состояния молекулы аллатостатина Dppu AST1.

Всего в интервал относительной энергии 0-10 ккал/моль попадают 59 конформаций, принадлежащих 19 шейпам пептидной цепи, что свидетельствует о конформационной подвижности молекулы аллатостатина Dppu AST1 в условиях водного окружения.

Глобальная конформация с $R_3R_1B_1R_3BR_3$ формой пептидной цепи (шейп ffefe) лишь на 0.51 ккал/моль уступает структурам полностью свернутого типа с $R_3R_1R_1B_2PR_3$ формой (шейп fffff), стабилизированной системой водородных связей (табл.4).

Таблица 3

Распределение конформаций по шейпам основной цепи в структуре молекулы аллатостатина Dppu AST1

Шейп	Интервал относительной энергии, ккал/моль					
	0÷1	1÷2	2÷3	3÷4	4÷5	>5
ffffff	-	-	2	2	3	3
ffefe	-	-	-	-	2	2
fffee	-	-	2	-	3	5
effee	-	-	-	-	1	-
effff	-	-	1	-	-	-
ffffff	1	-	-	1	-	1
ffeee	-	-	1	4	4	3
fffef	-	-	-	1	1	2
ffefe	1	1	-	-	-	-
efeee	-	-	-	2	-	1
effff	-	-	1	-	-	-
ffeff	1	1	1	-	-	2
fffef	-	-	-	-	-	2
effef	-	-	-	-	-	1

Таблица 4

**Водородные связи в низкоэнергетических конформациях
молекулы аллатостатина Dipru AST1**

N	Шейп	$E_{отн}$	Атомы водородной связи	Расстояние между атомами (Å)	$E_{вод.св.}$ (ккал/моль)
1	<i>ffefe</i>	0.00	Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.34	-0.54
2	<i>ffff</i>	0.51	Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.17	-0.83
			Asp3(CO ^δ)...Phe4(NH)	2.71	-0.19
			Phe4(NH)...Phe4(CO)	2.82	-0.14
3	<i>ffeff</i>	0.84	Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.18	-0.81
			Asp3(CO ^δ)...Gly5(NH)	2.17	-0.83
4	<i>effff</i>	2.06	Leu1(NH)...Leu1(CO)	2.66	-0.22
			Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.14	-0.88
			Asp3(CO ^δ)...Phe4(NH)	2.87	-0.12
5	<i>efeff</i>	2.26	Leu1(NH)...Leu1(CO)	2.66	-0.22
			Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.14	-0.89
			Asp3(CO ^δ)...Gly5(NH)	2.08	-1.02
6	<i>fffee</i>	2.44	CCO(CO)...Phe4(NH)	2.53	-0.32
			Asp3(NH)...Asp3(CO ^δ)	2.38	-0.47
			Phe4(NH)...Phe4(CO)	2.57	-0.28
7	<i>ffffe</i>	2.63	Leu1(CO)...Gly5(NH)	2.44	-0.41
			Asp3(NH)...Asp3(CO ^δ)	2.47	-0.38
8	<i>ffeee</i>	2.94	Asp3(NH)...Asp3(CO)	2.28	-0.62
			Asp3(CO ^δ)...Gly5(NH)	2.12	-0.92

ЛИТЕРАТУРА

1. Pratt G.E, Farnsworth D.E, Siegel N.R, Fok K.F, Feyereisen R. "Identification of an Allatostatin from Adult *Diploptera Punctata*" //Biochem. Biophys. Res. Commun., 1990, v.29, Iss.163(3), p.1243-1247
2. Stay B., Fairbairn S., Yu C.G. "Role of Allatostatins in the Regulation of Juvenile Hormone Synthesis" //Arch. Insect. Biochem. Physiol., 1996, v.32, No.3-4, p.287-297
3. Woodhead A.P., Stay B., Seidel S.L., Khan M.A., Tobe S.S. "Primary Structure of Four Allatostatins: Neuropeptide Inhibitors of Juvenile Hormone Synthesis" //Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 1989, v.85, No.15, p.5997-6001
4. Woodhead A.P., Klan M.A., Stay B., Tobe S.S. "Two New Allatostatins from the Brains of *Diploptera Punctata*" // Insect. Biochem. Mol. Biol., 1994, v.24, No.3, p.257-263
5. Попов Е.М. "Quantitative Approach to Conformations of Proteins" //Int. J. Quantum Chem., 1979, 16, p.707-737
6. Попов Е.М. Структурная организация белков. М.: Наука, 1989, 352с.
7. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. Программа полуэмпирического расчёта конформаций молекулярных комплексов на ЭВМ' //Журнал структурной химии, 1983, т.24, №4, с.147-148
8. Momany F.A., McGuire R.F., Burgess A.W., Scheraga H.A. "Energy Parameters in Polypeptides: Geometric Parameters, Partial Atomic Charges, Nonbonded Interaction for Naturally Occuring Amino Acid" //Phys. Chem., 1975, v.79, p.2361-2381
9. IUPAC-IUB Commision on Biochemical Nomenclature Abbreviations and Symbols for Description of Conformation of Polypeptide Chains //Pure Applied Chem., 1974, v.40, p.291-308.

DIPPU AST1 NEUROPEPTİDİNİN FƏZA QURULUŞU

L.İ.VƏLİYEVƏ, İ.N.ƏLİYEVƏ

XÜLASƏ

Allatostatinlər ailəsinə mənsub olan Dippu Ast1 neuropeptidinin nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə fəza quruluşu tədqiq edilmişdir. Molekuldaxili konformasiya enerjisinin ölçülməsi nəticəsində polyar mühitdə molekulun bütün mümkün stabil konformasiya halları kəmiyyətə qiymətləndirilmişdir.

Açar sözlər: neuropeptidlər, quruluş, konformasiya analizi

SPATIAL STRUCTURE OF THE DIPPU AST1 NEUROPEPTIDE

L.I.VALIYEVƏ, İ.N.ALIYEV

SUMMARY

The spatial structure of the Dippu Ast1 neuropeptide from allatostatin family has been established by the theoretical conformational analysis method. On the basis of the intramolecular conformational energy calculation, the quantitative evaluation of the possible conformational states of the molecule in water solution has been carried out.

Key words: neuropeptide, structure, conformational analysis

Поступило в редакцию: 18.02.2014 г.

Подписано к печати: 04.04.2014 г.