

## **N- И C-КОНЦЕВЫЕ ЭФФЕКТЫ АМИНОКИСЛОТ В ОРГАНИЗАЦИИ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ ОЛИГОПЕПТИДОВ**

**Самченко А.А., Кабанов А.В., Комаров В.М.**

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290 Пущино,  
Тел. 8(4967)73-94-04, e-mail: open13@mail.ru

В настоящее время в описании процесса структурной организации белков доминирующими являются феноменологические подходы. Однако, практически все они не затрагивают одну общую проблему - проблему самого первичного физического акта, инициирующего самоорганизацию полипептидной последовательности в уникальную функциональную молекулярную форму. Распространено использование в таких исследованиях лишь статистических наблюдений о некоторой изначальной предрасположенности составляющих аминокислот к организации того или иного вида вторичной структуры олигопептидной цепи.

В наших предыдущих работах, на базе полуэмпирических РМЗ и неэмпирических МР2 квантово-химических расчетов особенностей электронной структуры одиночных молекул дипептидов различной природы, было отмечено, что важным моментом в процессе «самоорганизации» формы молекулярного остова пептидного образования может выступать обнаруженная высокая торсионная гибкость (структурный полиморфизм) основного элемента - фрагмента  $O=C-NH$ . Как показал детальный анализ электронного строения этой группы, поведение поверхности потенциальной энергии ее основного состояния оказывается весьма своеобразным и очень чувствительным к химической природе ближайшего окружения. Так, например, для одного и того же аминокислотного остатка в зависимости от того находится ли он на N- или на C-конце пептидной группы реализуется разный непланарный полиморфизм структуры  $O=C-NH$  фрагмента. Соответственно, и конкретный тип и положение боковой группы оказались значительно определяющими и величину и направление начального «излома» пептидной группы (наклона  $H-N$ -связи относительно плоскости  $O=C-N$ ) в структуре сложного пептидного образования. Поэтому, дальнейшее исследование влияния N- и C-концевых эффектов в пептидных группах на процесс регуляризации структуры олигопептидного остова в различных аминокислотных последовательностях представляется чрезвычайно актуальным.

В данной работе проведен сравнительный квантово-химический анализ структурных, спектральных и термодинамических характеристик олигопептидов в различных вариантах аминокислотных последовательностей. Выделены параметры электронной структуры пептидных фрагментов  $O=C-N-H$  наиболее четко коррелирующие с предрасположенностью рассматриваемых олигонуклеотидов к организации того или иного типа вторичной структуры ( $\alpha$ -спиралей,  $\beta$ -излома или  $\beta$ -слоя). Рассмотрена роль внутримолекулярного энтропийного фактора в регуляризации структуры и компактизации формы олигопептида. Оценен вклад молекул связанной воды в стабилизацию спиральной формы некоторых аминокислотных последовательностей.