

**БОКОВЫЕ ЦЕПИ МОНОПЕПТИДОВ АСПАРТАТА И ГЛУТАМАТА
СПОСОБНЫ ИНДУЦИРОВАТЬ ИЗМЕНЕНИЕ УГЛОВ «ФИ» И «ПСИ».
ДЕПРОТОНИРОВАНИЕ КАРБОКСИЛЬНЫХ ГРУПП
И СПИРАЛИЗАЦИЯ ОСТОВА**

Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Комаров В.М.

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, г. Пущино, ул. Институтская, д.3
Тел. 8(4967)73-94-04, e-mail: ma-ko@bk.ru

Детальное изучение условий, определяющих уникальные зарядовые свойства и конформационные возможности отдельных аминокислотных остатков, помогают лучше понять физические процессы, происходящие на ранних стадиях сворачивания белка. Одной из таких важнейших стадий является «зарождение» альфа-спиралей в структуре полипептидных цепей.

Цель данного исследования состоит в том, чтобы, опираясь на статистику распределения аминокислот в тех или иных вторичных структурах белков, попытаться сконкретизировать структурные факторы, благодаря которым кислые аминокислотные остатки способны выступать активными инициаторами альфа-спирализации.

Известно, что остатки аспартата и глутамата способны формировать внутримолекулярные водородные связи с атомами остова полипептидной цепи. Ранее нами было показано, что в монопептидах таких аминокислот всегда имеет место появление бифуркационных водородных связей, которые, могут способствовать определенному «закручиванию» молекулярного остова и, таким образом, формировать структуру близкую к структуре первого витка спирали. Поскольку нативным условиям функционирования белковых молекул отвечает гидратная среда с определенной ионной силой, то представлялось чрезвычайно важным оценить влияние депротонирования карбоксильных групп таких остатков на поведение геометрии остова основного состояния изолированных одигопептидов в ряду Asp-(Ala)_N, Glu-(Ala)_N (где N изменяется от 1 до 4). При этом, особое внимание уделялось изменению специфики бифуркационного водородного связывания аспартата и глутамата при переходе от нейтральной формы олигопептида - к заряженной форме.

Для рутинных расчетов структурных, спектральных и термодинамических свойств олигопептидов в данной работе был использован полуэмпирический квантово-химический метода PM3. Для уточнения ряда структур нами были использованы более точные, *ab initio* квантово-химические схемы расчета такие, как: MP2/6-311++G** и CBSQ.

Полученные результаты подтвердили развиваемую идею о высокой эффективности депротонированных форм остатков таких кислых аминокислот образовывать устойчивые внутримолекулярные водородные связи с остовом макромолекулы. Причем, по своим энтальпийно-энтропийным характеристикам эти структуры оказываются более устойчивыми по сравнению с нейтральными формами. При этом, параметры самого остова такого олигопептида, его конформационные углы «фи» и «пси», с удлинением цепи становятся все более близкими к параметрам правых альфа-спиралей природных белков.