

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В СПИРАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ ОЛИГОПЕПТИДОВ. НОВЫЙ ВЗГЛЯД

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

Учреждение Российской академии наук Институт биофизики клетки РАН, Россия,
142290, г. Пущино, ул. Институтская, 3, тел. 8(4967)73-94-04,
e-mail: open13@mail.ru

В работе обобщаются результаты авторов по теоретическому исследованию нетривиальных особенностей водородных связей в структуре Н-связанных амидов, а также в структуре амидных групп в составе полипептидов и белков. В соответствии с накопленными экспериментальными данными показана важная роль внутренней бистабильности неплоской геометрии пептидного фрагмента $O=C-NH$ в организации оптимальной геометрии водородных связей в спиральных и слоистых формах олигопептидов. Обсуждается поведение «пирамидализации» валентных связей атома азота пептидных групп при их водородном связывании в зависимости от природы боковых остатков, а также от встраивания в структуру комплекса молекул воды.

Обосновывается ключевая роль заряженных аминокислотных остатков аспартата, глутамата, аргинина, лизина и гистидина в инициировании и терминировании процессов спирализации олигопептидов. Показано, как за счет формирования внутримолекулярных бифуркационных водородных связей и возникновения специфической «закрутки» молекулярного остова кислые аминокислоты аспартата и глутамата могут запускать спирализацию полипептида с N-конца цепи («прямая» альфа-спирализация). Продемонстрировано, как основные аминокислотные остатки аргинина, лизина и гистидина с их спецификой геометрии молекулярного остова с бифуркационными водородными связями могут выступать в качестве терминирующего фактора процесса спирализации. Отмечается согласие установленной закономерности с наблюдаемым в статистике пограничным расположением данных остатков – до и после спирального участка в нативных последовательностях.

Делается вывод о важности учета рассмотренных эффектов для правильного понимания процесса организации и стабилизации вторичной структуры олигопептидов различной природы.