

ОСОБЕННОСТИ ГИДРАТАЦИИ ОСНОВНЫХ КОНФОРМАЦИЙ ПОЛИПЕПТИДНЫХ ЦЕПЕЙ ПЕПТИДОВ И БЕЛКОВ, ИХ СТРУКТУРНАЯ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ

Есипова Н.Г., Намиот¹ В.А., Батыновский² А.В., Филатов И.В., Айзенхабер³ Ф., Молдавер М.В., Туманян В.Г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской академии наук, 119991, Россия, Москва, ул. Вавилова 32, **E-mail:** nge@eimb.ru

¹ – Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Институт ядерной физики, Москва, Воробьевы горы, 1;

² – Институт биофизики клетки и клеточной инженерии НАН Беларуси, Минск;

³ – Institute of Bioinformatics, Singapore

Анализ гидратации основных вторичных структур проведен с использованием метода Монте Карло. Охарактеризована гидратация полярных групп. Оценена вероятность Н-связи с водой. Найдены мостики из нескольких молекул воды и оценена вероятность таких мостиков для основных конформаций полипептидных цепей.

Обсуждается, как энергетические параметры гидратации связаны с конформационной устойчивостью пространственных структур соответствующих полипептидов и их термостабильностью по отношению к условиям среды.

Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проекты № 12-04-01776-а и № 12-04-90051-Бел_а).

FEATURES OF HYDRATION OF THE MAIN CONFORMATIONS OF PEPTIDES AND PROTEINS, STRUCTURAL AND THERMODYNAMIC STABILITY

Esipova N.G., Namiot¹ V.A., Batyanovsky² A.B., Filatov I.V., Eisenhaber³ F., Moldaver M.V., Tumanyan V.G.

Engelharhard Institute of Molecular Biology of the Russian Academy of Sciences 119991, Russia, Moscow, Vavilov str. 32, **E-mail:** nge@eimb.ru

¹ – Lomonosov Moscow State University, Institute of Nuclear Physics, 119992, Moscow, Vorob'evy gori, 1;

² – Institute of Cell Biophysics and Cell Engineering NAN Belorussia, Minsk;

³ – Institute of Bioinformatics, Singapore

Analysis of hydration of the main secondary structures has been fulfilled by Monte Carlo method. Hydration of polar groups was characterized. Probability of hydrogen bonds to water was estimated for basic conformations of polypeptide chains as well as bridges via water molecules closing.

We discuss the interconnection between energetic hydration parameters and conformational stability of polypeptides 3D structures relatively environmental conditions.

The work is supported by RFBR (projects № 12-04-01776-a and № 12-04-90051-Bel_a).