

ВОДА В КОЛЛАГЕНЕ

Туманян В.Г., Филатов И.В., Намиот¹ В.А., Анашкина А.А., Молдавер М.В., Мильчевский Ю.В., Рубин М.А., Айзенхабер³ Ф., Есипова Н.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, 119992, Москва, Воробьевы горы, 1;

² – Institute of Bioinformatics, Singapore

В данной работе проведен сравнительный анализ архитектуры гидратации трехспиральных макромолекул коллагенов и олиготрипептидов аминокислот на основании дифракционного исследования волокон коллагенов и с использованием метода Монте Карло. Установлено, что трехцепная макромолекула коллагена имеет гидратные центры на поверхности коллагена, содержащей эквивалентно расположенные СО-группы.

Анализ термодинамических характеристик коллагенов с различной долей аминокислот, в том числе оценка размеров кооперативных областей на основании сравнения калориметрической и Вант-гоффовской энтальпий, проведены методами микрокалориметрии. Показано, что тонкая регуляция термостабильности коллагенов аминокислотами осуществляется как за счет изменения числа кооперативных участков в еще нативной структуре, так и за счет нарушения кооперативной гидратации постденатурационной одиночной левой спирали типа полипролин II в местах включения в нее аминокислот. Можно утверждать, что организация фибрилл возможна лишь при условии, если температура денатурации трехцепной макромолекулы коллагена находится в области физиологических температур.

Работа поддержана Программой Президиума РАН «Фундаментальные науки – медицине» и Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проекты № 12-04-01776-а и № 12-04-90051-Бел_а).

WATER IN COLLAGEN

Tumanyan V.G., Filatov I.V., Namiot¹ V.A., Anashkina A.A., Moldaver M.V., Milchevsky Yu.V., Rubin M.A., Eisenhaber² F., Esipova N.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, Moscow, Vorob'evi gori, 1;

² – Institute of Bioinformatics, Singapore

In this work the comparative analysis of architecture of three chain collagen macromolecules hydration, as well as oligopeptides contained amino- and imino acids was fulfilled on the basis of diffraction studies of collagen fibrils and by Monte Carlo methods.

It was pointed that three chain collagen macromolecule has hydration center at the collagen surface, which contain equivalently situated CO-groups. The analysis of thermodynamic characteristics of collagens with various shares of imino acids that include the size cooperativity regions estimation by comparison the values of calorimetric and Vant Hoff enthalpy was performed by microcalorimetric method.

It was shown that fine regulation of thermo stability of collagens by imino acids can be performed not only by variation of the number of cooperative segments but also due to disorder of single post denatured polyproline II left-handed helix cooperative hydration in the sites of imino acids inclusion.

It is quite probably that proper fibril organization is useful only if the temperature of three chain collagen macromolecule denaturation fall in the range of physiological temperatures.

The work is supported by Program of Presidium RAS «Fundamental sciences to Medicine» and RFBR (projects № 12-04-01776-a and № 12-04-90051-Bel_a).