

VESINIKSIDEMED - TERVISE ALUSTOED BIOLOOGILISTES ORGANISMIDES

Raik-Hiio Mikelsaar

Bioloogilistes organismides leiduvad keemilised ühendid (valgud, nukleiinhapped, süsivesikud jt.) koosnevad kovalentsete sidemetega seotud aatomitest. Need sidemed on väga tugevad, tagades molekulidele suhteliselt püsiva **primaarstruktuuri**. Naaberaatomite kaugus primaarstruktuuris on tavalistes tingimustes konstantne, kuid tänu aatomite pöörlemisele kovalentsete sidemete ümber võib muutuda üksteisest kaugemal asuvate aatomite ja aatomigruppide omavaheline asend ruumis (konformatsioon). Vaatamata sellele, et primaarstruktuur kogu oma konformatsioonilise "repertuaariga" määrab keemiliste ühendite spetsiifika organismis, on nende ainete funktsioneerimise otseseks garanteerijaks **sekundaar-** ja **tertsiaarstruktuur**. Viimatinimetatud ainevormid kujunevad primaarstruktuuri alusel eelkõige **vesiniksidemete (VS)** moodustumise tagajärjel vastavas konformatsioonis molekuliosade ja naabermolekulide vahel. Nii näiteks on ensüümide efektiivne talitlus võimalik vaid siis, kui teatavad aminohappejäägid nende koostises moodustavad VS vahendusel α - ja β -struktuure ja need omakorda molekulide nn. **aktiivsenti**. Nukleiinhapetes tagavad VS komplementaarsete lämmastikaluste vahel valikulise seostumise, mis ongi pärilikkuse molekulaarmehhanismi aluseks. Polüsahhariidides kujundavad VS vastavalt primaarstruktuurile spetsiifilise energeetilise või toetusfunktsiooniga molekulaarvormi.

On arusaadav, et kui VS on nii oluline tähtsus organismide ehituses ja talitluses, siis häired nende tekkes võivad olla **haigusprotsesside** põhjuseks. Kui nukleotiidide lämmastikalused paarduvad mitte komplementaarsete alustega, vaid "valepartneritega", siis tekivad nukleiinhapetes mutatsioonid. Kui ensüümimolekulis lõhkuda VS ja tekitada seostuvates aatomites keemilised modifikatsioonid, siis ei saa selline valk renatureeruda ja kaotab ensümaatilise aktiivsuse. Samasugune lugu on polüsahhariididega: muutused nende ainete VS võrgustikus põhjustavad häireid energeetilise või toetusfunktsiooni realiseerimisel.

ÜMPI molekulaarmodelleerimise laboris on keemiliste ühendite ruumilise struktuuri uurimiseks kasutatud plastmassist atomaar-molekulaarseid mudeleid [1, 2]. Need vahendid on VS tekkevõimaluste selgitamisel eriti efektiivsed siis, kui uuritavaid aineid ei õnnestu kristalliseerida ja teha röntgenstruktuuranalüüsi. Me oleme saanud uudseid andmeid transportribonukleiinhapete, biomembraanide lipiidide, tselluloosi ja hüaluroonhappe konformatsiooni ning sekundaar- ja tertsiaarstruktuuri kohta. Molekulaarmodelleerimine kinnitas VS olulist osa organismi keemiliste komponentide

ja neist moodustunud kompleksstruktuuride normaalse ja patoloogilise seisundi kujunemisel [3 - 5].

Kirjandus

1. Mikelsaar, R.-H. N., Bruskov, V. I., Poltev, V. L (1985). New Precision Space-Filling Atomic-Molecular Models, Pushchino.
2. Mikelsaar, R. (1986). Trends Biotechn., 4, 162-163.
3. Mikelsaar, R. (1981). J. Theor. Biol., 92, 163-180.
4. Mikelsaar, R. (1987). Molecular Crystals and Liquid Crystals, 152, 229-257
5. Mikelsaar, R., Kuznetsova, N. (1992). In: Ligno-Cellulosics, Ellis-Horwood, pp. 472-483.