

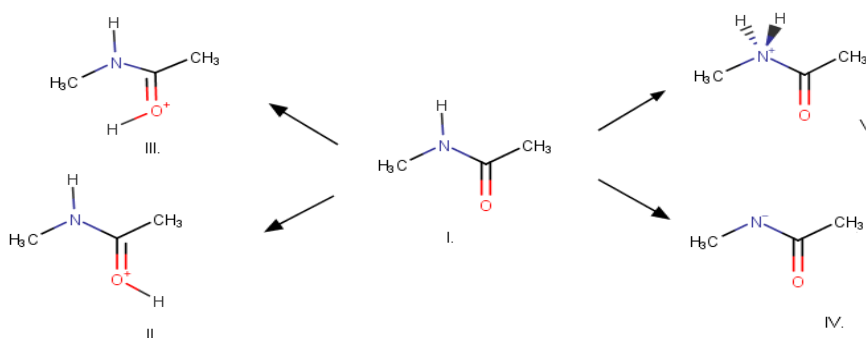
# Semleges, protonált és deprotonált peptid kötés transz->cisz izomerizációja

Kelemen Ádám András, II. évf. fizikus

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **dr. Jákli Imre** tudományos főmunkatárs  
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport  
**Dr. Csizmadia Imre Gyula** egyetemi tanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

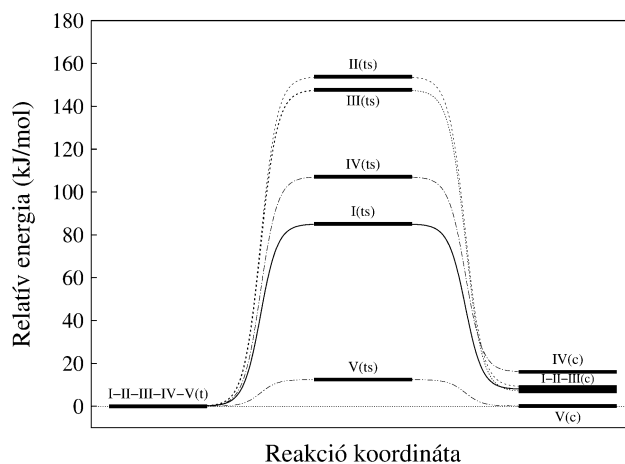
Az N-metil acetamid (I) (1. ábra) segítségével tanulmányoztuk a peptidkötés transz->cisz izomerizációját. Ehhez a következő öt esetet vizsgáltuk: amikor az amidkötés oxigénje van protonálva, egyszer a nitrogénhez közel (II), máskor a nitrogéntől távoli (III) pozícióban, valamint a deprotonált(IV) és protonált (V) nitrogén esetét.



1. ábra: A vizsgált semleges(I), O-protonált (II,III), N-protonált (V) és N-deprotonált (IV) peptid modellek

A semleges molekula izomerizációjának B3LYP/6-311++G(d,p) elméleti szinten meghatározott átmeneti állapotának Gibbs potenciálja 85,1 kJ/mol volt. A karbonil oxigénjének savas protonálása a gátmagasságot 150±4 kJ/mol fölé emelte, mert a nitrogén magános elektronpárja erősebben konjugálódott a karbonilcsoporttal. A peptidkötés deprotonálása a nitrogéne 105 kJ/mol fölé emelte az átmeneti állapot Gibbs potenciálját, mivel itt is erősödött a konjugáció.

Ezzel ellentétben a peptidkötés nitrogén atomjának protonálása lecsökkentette a gátmagasságot 12,4 kJ/mol-ra. Ennek alapján ezzel a mechanizmussal történhet legnagyobb valószínűséggel a peptidkötés transz->cisz- izomerizációja.



2. ábra: Az átmeneti(ts) és cisz(c) állapotok energiáit a saját transz (t) állapotukhoz viszonyítva.