

## Химическое эмодзи (автор - Гарифуллин Б.Н.)

Наш старый добрый знакомый (смотри предыдущие серии по [ссылке](#)), агент, осуществляющий шпионаж в нанобиологическо-исследовательском федеральном инновационном городе-агломерации (НИФИГА), выяснил структуры крайне важных для задач Центра изомерных соединений **X** и **Y**.

Для шифрования структуры этих соединений он использовал специальные пиктограммы – эмодзи, установив соответствующее расширение для браузера.

Соединение **X** в полученной шифровке выглядит так:



А соединение **Y** так:



1. Попробуйте установить возможные структуры **X** и **Y**.
2. Существуют ли еще вещества, изомерные **X** и **Y**:
  - a) относящиеся с ними к одному классу соединений;
  - b) обладающие схожей биологической активностью?
3. Какую пространственную структуру будут иметь **X** и **Y** в водном растворе?
4. Объясните, почему в случае обработки соляной кислотой в жестких условиях соединений **X** и **Y** продукты реакции отличаются только по одной позиции.

## Решение (10 баллов)

1. С учетом того, что шпионаж осуществляется в нанобиологическом центре, а также того факта, что соединения, структуры которых высылал агент в предыдущий раз (смотри задачу "пептидное какуро" заочного тура наноолимпиады 2014 г.), – олигопептиды, можно предположить, что и в этот раз мы имеем дело с пептидами. Понятно, что для каждой пиктограммы (или их комбинации, что утяжеляет ситуацию) необходимо подобрать соответствующую аминокислоту. Значительно упрощает ситуацию знание того факта, что соединения X и Y являются изомерами, что говорить о схожести их аминокислотных последовательностей. Например, изображение сыра или героя анимационного сериала "Чип и Дейл спешат на помощь" Рокфóра (англ. *Monterey Jack*) или Рокки – самца мыши, имеющего сильнейшую, непреодолимую тягу к сыру, однозначно указывает на остаток аминокислоты тирозин, чье название произошло именно от названия данного пищевого продукта. Более сложная ситуация возникает с наличием в обоих случаях за скобками эмодзи в виде недовольного, кислого выражения лица. С учетом того, что изображение злакового и листовного растения встречается в обоих соединениях, можно догадаться, что "кислая" мордочка кодирует дефиницию кислота в случае аспарагиновой (изображение спаржи) и глутаминовой (глутен, клейковина как группа белков, обнаруженных в ряде злаков) кислот. Шелковое платье и рубашка из аналогичного материала указывают на серин. Английское обозначение ДНК (DNA) отсылает к гистидину, чье название произошло от гистонов – широкого класса ядерных белков. Цифровые обозначения соответствуют молярным массам соответствующих аминокислот, данных с точностью до второго знака после запятой. Белый квадрат в противовес творчеству Казимира Малевича подразумевает под собой или лейцин, или изолейцин (от др.-греч. λευκός – белый).

Отсюда структуры X и Y с учетом невозможности проведения различия между лейцином и изолейцином:

X: Asp-Tyr-Leu-Gln-Ser-Hys или Asp-Tyr-Ile-Gln-Ser-Hys,

Y: Asn-Leu-Ser-Glu-Hys-Tyr или Asn-Ile-Ser-Glu-Hys-Tyr.

(по 1,5 баллу за структуру, всего 6 баллов)

2.

а) Вещества, изомерные X и Y и являющиеся гексапептидами, конечно, существуют: их легко получить путем перестановки искомым аминокислот между соответствующими позициями (например, перестановка местами остатков гистидина и серина в соединении X).

б) биологическая активность пептидов крайне трудна предсказуема, исходя из их первичной аминокислотной последовательности: это означает, что однозначный ответ на данный вопрос представить невозможно.

(по 1 баллу за каждый пункт, всего 2 балла)

3. Образование регулярной вторичной структуры в крайне небольших пептидах X и Y не происходит, что означает их нахождение в водном растворе в развернутом состоянии, которое стабилизируется случайными (заранее непредопределенными) внутри- и межмолекулярными связями.

(0,5 балла)

4. Аспарагин и глутамин в условиях полного гидролиза пептидов гидролизуются до аспарагиновой и глутаминовой кислот, соответственно. Тем самым, отличие продуктов гидролиза по одной позиции будет объясняться наличием в растворах лейцина и изолейцина.

(1,5 балла)