

Квантово-химическое моделирование пептидных водородных связей в димере глицина

© Лысенок Алена Александровна и Волкова*⁺ Татьяна Геннадьевна

Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет, ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (4923) 37-37-03. E-mail: tgvolkova@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сильная водородная связь, аминокислоты, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Актуальной является задача изучения природы водородных связей в биологически активных и лекарственных веществах. Нестабильность водородной связи может существенным образом сказываться на состоянии фармацевтических препаратов, содержащих, например, аминокислоты при их длительном хранении, транспортировке или технологической обработке. Один из методов исследования природы и определения силы водородных связей – это квантово-химическое моделирование. Моделирование димера α -глицина проводилось в рамках теории самосогласованного реакционного поля методом DFT/B3LYP/6-31G (d, p) с полной оптимизацией геометрии без ограничений по симметрии. Теоретические спектры были получены на основе результатов расчета силового поля в гармоническом приближении. Визуализация результатов расчета проводилась в программе ChemCraft. В теоретическом КР-спектре к колебаниям водородной связи относятся только низкочастотные (2500 см^{-1}) колебания водородных N–H...O связей двух молекул. Расчеты показывают особенность такой водородной связи – при сохранении водородной связи рвутся N–H и образуются O–H. В области $3200\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ находятся четыре линии, из которых каждая соответствует валентным колебаниям свободных N–H связей аминокислотной группы одной молекулы. Расчет энергии взаимодействия в исследуемом ассоциате и ее декомпозиция были проведены по методу Морокумы (HF/6-31G (PC GAMESS)). Установлено, что в энергию взаимодействия двух молекул глицина вносят значительные вклады все компоненты, за исключением энергии смешивания. Величина энергии взаимодействия с учетом ошибки суперпозиции базисного набора (BSSE) составляет -58.28 ккал/моль и соответствует двум сильным водородным связям и не противоречит данным о кристаллической структуре α -глицина.