

## Моделирование водородных связей в молекулярных кристаллах тирозина

© Волкова<sup>1\*</sup> Татьяна Геннадьевна и Таланова<sup>2+</sup> Ирина Олеговна

<sup>1</sup> Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет.  
ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (4932) 37-37-03. E-mail: [tgvolkova@yandex.ru](mailto:tgvolkova@yandex.ru).

<sup>2</sup> Кафедра биохимии. Ивановская государственная медицинская академия.  
Шереметевский пр., 8. г. Иваново, 153012. Россия. Тел.: (908) 569-72-43. E-mail: [i75@list.ru](mailto:i75@list.ru).

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** аминокислоты, тирозин,  $\alpha$ -амино- $\beta$ -параоксифенилпропионовая кислота, водородная связь, межмолекулярное взаимодействие, моделирование.

### Аннотация

Задача исследования водородных связей в биомолекулах и живых системах является актуальной. Среди лекарственных препаратов врачи особо выделяют вещества природного происхождения, участвующие в обменных процессах. К таким соединениям относятся аминокислоты, пептиды, витамины, ферменты, макро- и микроэлементы и другие биологически активные вещества, многие из которых способны образовывать водородные связи. Аминокислоты и их производные – препараты метаболической фармакотерапии, характеризующиеся малой токсичностью и выраженностью побочных эффектов, а также отсутствием алергизирующего влияния, являются перспективными для создания лекарственных препаратов или их модификации. Нестабильность водородной связи может существенным образом сказываться на состоянии фармацевтических препаратов, содержащих, например, аминокислоты, при их длительном хранении, транспортировке или технологической обработке. Одним из методов исследования природы и определения силы водородных связей является квантово-химическое моделирование. Расчет энергии взаимодействия в исследуемом ассоциате и ее декомпозиция были проведены по методу Морокумы (HF/6-31G (PC GAMESS)). Дана оценка таким компонентам энергии как электростатическая, обменного отталкивания, поляризованная, переноса заряда, смешивания. Основной вклад в энергию взаимодействия дает электростатическая составляющая. Тенденция распределения компонентов энергии взаимодействия по величинам одинакова у всех исследуемых моделей. Отмечен факт существенного отличия энергии взаимодействия в двух модельных системах, что объясняется разной геометрией водородных связей. Проведенное сопоставление данных позволило сделать вывод о присутствии в молекулярном кристалле тирозина трех типов водородных связей, отличающихся друг от друга по энергетике и геометрии.