

Моделирование водородных связей в молекулярных кристаллах аланина

© Волкова^{1*} Татьяна Геннадьевна, Шаджаева¹ Айгул Нургелдиевна
и Таланова²⁺ Ирина Олеговна

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

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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аминокислоты, аланин, водородная связь, межмолекулярное взаимодействие, моделирование.

Аннотация

Исследование водородных связей (*H*-связей) в биомолекулах и живых системах является в настоящее время одной из актуальных задач. Изменения в структуре молекулярных кристаллов, связанные с нестабильностью *H*-связи, могут отражаться на состоянии лекарственных препаратов вследствие неконтролируемых полиморфных превращений. Квантово-химическое моделирование является одним из методов исследования природы и определения силы водородных связей. Расчет энергии взаимодействия в молекулярных кристаллах аланина 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. Показано, что для четырех модельных систем электростатическая составляющая дает основной вклад в энергию взаимодействия, а тенденция распределения компонентов ΔE по величинам у них одинаковая. Для двух модельных систем наблюдается существенное отличие от остальных и по величине энергии взаимодействия и по распределению отдельных компонентов энергии. Разница в энергии взаимодействия и в величинах ее компонентов свидетельствует о различии природы водородных связей в исследуемом ассоциате. В четырех модельных системах *H*-связь является результатом электростатического взаимодействия (E_{es} и E_{ct} соответственно равны -41.0 и -6.84 ккал/моль), а в двух – доля ковалентного взаимодействия значительно больше ($E_{es} = -7.94$ ккал/моль и $E_{ct} = -3.92$ ккал/моль). Проведенное сопоставление данных позволяет сделать вывод о присутствии в молекулярном кристалле аланина трех типов водородных связей, отличающихся друг от друга по энергетическим характеристикам.