

Водородные связи в молекулярных кристаллах аланина и тирозина: NBO анализ

© Волкова^{1*} Татьяна Геннадьевна, Таланова²⁺ Ирина Олеговна
и Абдухалимова¹ Ирода Мамиржон кизи

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

² Кафедра 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, тирозин, водородная связь, межмолекулярное взаимодействие, моделирование, NBO анализ.

Аннотация

В настоящее время теоретические представления о водородной связи (Н-связи) в конденсированных средах, например, в живых системах, биомолекулах, решены не до конца. В качестве одного из методов изучения природы и определения силы Н-связи используется квантово-химическое моделирование. В данной работе продолжено исследование системы водородных связей в молекулярных кристаллах аланина и тирозина. Моделирование димеров этих аминокислот проведено с помощью метода DFT с использованием функционала B97D с базисами 6-31++G^{**}. В рамках NBO анализа рассчитаны энергии стабилизации образующейся водородной связи и величина перенесенного заряда. Показано, что в димерах аланина основным фактором, влияющим на энергию стабилизации Н-связи, являются геометрические параметры и прежде всего $\angle(\text{N}-\text{H}\cdots\text{O})$. Связывающая σ -орбиталь водородной связи является результатом взаимодействия гибридной NBO неподделенной пары атома кислорода и разрыхляющей σ^* -NBO связи N–H. Характер образования связей во всех трех случаях одинаков, а величина переноса заряда больше величины критерия связи, что свидетельствует о наличии водородных связей во всех анализируемых системах аланина. В димерах тирозина идет образование двух Н-связей, которые близки по природе, а также геометрическим и энергетическим параметрам. Третья Н-связь является очень слабой, а величина переноса заряда вообще свидетельствует об ее отсутствии. Основным взаимодействием между молекулами в третьем димере тирозина является Н-связь между группами –COO⁻ и –ОН. Установлено, что схема образования водородных связей в молекулярных кристаллах тирозина несколько отличаются от аланина.