

Водородные связи в молекулярных кристаллах серина: метод Морокумы и 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, серин, водородная связь, межмолекулярное взаимодействие, моделирование, метод Морокумы, NBO анализ.

Аннотация

Проведено квантово-химическое моделирование методами Морокумы (HF/6-31G(PCGAMESS)) и DFT/B97D/6-31++G** (Gaussian 03), а также исследование природы и энергетических характеристик водородных связей (Н-связей) N–H \cdots O и O–H \cdots O в молекулярных кристаллах серина. Расчет энергии взаимодействия и ее декомпозиция по методу Морокумы позволили оценить такие составляющие, как электростатическая, обменного отталкивания, поляризованная, переноса заряда, смешивания. Показано, основной вклад в энергию взаимодействия дает электростатическая составляющая. Восемь Н-связей по своим энергетическим характеристикам делятся на три разных типа –N–H \cdots O и один O–H \cdots O. В рамках NBO анализа рассчитаны энергии стабилизации образующейся водородной связи и величина перенесенного заряда. Показано, что в димерах серина основным фактором, влияющим на энергию стабилизации Н-связи, являются геометрические параметры и прежде всего $\angle(\text{N-H}\cdots\text{O})$. Установлено: связывающая σ -орбиталь водородной связи – результат взаимодействия гибридной NBO неподеленной пары атома кислорода и разрыхляющей σ^* -NBO связи N–H. Обнаружено, что характер образования связей во всех трех случаях одинаков. По силе Н-связи можно соотнести следующим образом: в первом является средней, в двух других – слабой. Результаты NBO анализа показывают, что из присутствующих во втором димере двух неравноценных водородных связей, образованных одним атомом Н (по данным рентгеноструктурного анализа), реализуется только одна. На это указывает величина переноса заряда. Н-связи между гидроксогруппами, образованные при взаимодействии гибридной NBO неподеленной пары атома кислорода и разрыхляющей σ^* -NBO связи O–H, относятся к слабым.