

## Квантово-химическое моделирование водородных связей в гидроксилсодержащих аминокислотах

© Волкова Татьяна Геннадьевна,<sup>1\*</sup> Таланова Ирина Олеговна,<sup>2+</sup>  
Аликулова Ирода Мамиржон кизи<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Кафедра фундаментальной и прикладной химии. Ивановский государственный университет.  
ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: +7 (493) 237-37-03. E-mail: tgvolkova@yandex.ru

<sup>2</sup> Кафедра биохимии. Ивановская государственная медицинская академия. Шереметевский пр., 8.  
г. Иваново, 153012. Россия. Тел.: +7 908 569 7243. E-mail: i75@list.ru.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** аминокислоты, серин, тирозин, треонин, водородная связь, межмолекулярное взаимодействие, моделирование, NBO анализ.

### Аннотация

Интерес к аминокислотам, как к веществам перспективным для создания фармацевтических препаратов, традиционно высок. Причины столь высокого внимания – это не только их потенциальное использование в медицине, но и теоретические исследования по определению трехмерной организации молекулярных кристаллов аминокислот (АК) при водородной связи (*H*-связи). Квантово-химическое моделирование является одним из методов изучения *H*-связи. В данной работе исследована природа водородных связей в молекулярных кристаллах треонина, а также проведен сравнительный анализ трех гидроксилсодержащих аминокислот: серина, тирозина и треонина. Димеры этих аминокислот моделировали с помощью метода DFTc использованием функционала B97Dc базисом 6-31++G\*\*. В рамках NBO (Natural Bond Orbital) анализа рассчитаны энергии стабилизации образующейся водородной связи и величина перенесенного заряда. Отмечено соблюдение основных тенденций, связывающих величину энергии стабилизации и геометрических параметров водородной связи. Показано, что *H*-связи между протонированной аминогруппой, депротонированной карбоксильной группой и гидроксильной группой с близлежащими аминокислотами в молекулярных кристаллах изученных соединений имеют схожий механизм образования – связь N–H $\cdots$ O образуется при взаимодействии гибридной NBO неподеленной пары атома кислорода и разрыхляющей  $\sigma^*$ -NBO связи N–H; а O $\cdots$ H–O является результатом взаимодействия гибридной NBO неподеленной пары атома кислорода и разрыхляющей  $\sigma^*$ -NBO связи O–H. Результаты моделирования показывают сильное отличие энергетических характеристик связи O $\cdots$ H–O в тирозине и треонине по сравнению с серином. Появление метильной группы или бензольного кольца в структуре АК приводит к стерическим затруднениям в образовании этих связей и выравниванию ее силы.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Волкова Т.Г., Таланова И.О., Аликулова Ирода Мамиржон кизи. Квантово-химическое моделирование водородных связей в гидроксилсодержащих аминокислотах. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.74. №6. С.129-135. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-6-129

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Волкова Т.Г., Таланова И.О., Аликулова Ирода Мамиржон кизи. Квантово-химическое моделирование водородных связей в гидроксилсодержащих аминокислотах. *Бутлеровские сообщения* С.2023. Vol.5. No.2. Id.18. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RC/23-5-2-18.