

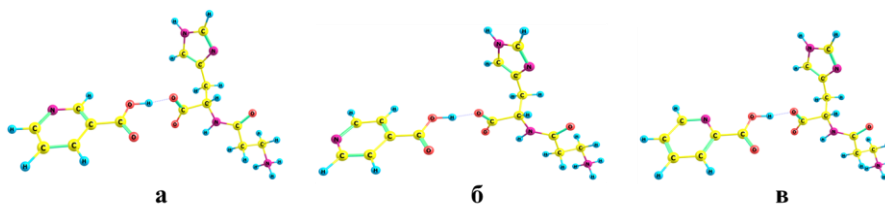
**ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ В КОМПЛЕКСАХ  
«ПИРИДИНКАРБОНОВАЯ КИСЛОТА – КАРНОЗИН»  
ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

*Дунаева В.В., Ставнова А.А.*

Ивановский государственный химико-технологический университет  
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

Проведено теоретическое исследование взаимодействия ряда пиридинкарбонowych кислот – никотиновой, изоникотиновой и пиколиновой кислоты (NA, IA и PA, соответственно) с карнозином (Car). Квантово-химические расчеты выполнены в пакете программ Gaussian\_03 методом теории функционала плотности B3LYP в комбинации с корреляционно-согласованным базисом cc-pVTZ. Моделирование водного окружения проводили с помощью РСМ. Соотношение компонентов комплексов, образуемых в жидкой фазе, принималось равным 1:1.

Вследствие широкого изучения структуры молекул пиридинкарбонowych кислот, исходная геометрия для IA, NA и PA взята из литературы, после чего проведена их дальнейшая оптимизация на выбранном уровне теории B3LYP/cc-pVTZ. Для молекулы Car выполнен конформационный поиск структуры с наименьшей энергией. После этого построены комплексы пиридинкарбонová кислота - карнозин, произведена оптимизация их геометрии, получены энергии и частоты колебаний. Структуры образуемых комплексов приведены на рисунке.



Структуры комплексов пиридинкарбонová кислота – карнозин:  
а) NA-Car, б) IA-Car, в) PA-Car

Установлено, что между молекулами компонентов комплекса возникает водородная связь, которая стабилизирует структуру комплекса. Рассчитаны значения энергии перекрывания и величины перенесенного заряда с орбитали, соответствующей неподеленной электронной паре атома кислорода карбонильного фрагмента карнозина, на разрыхляющую орбиталь ОН-связи в пиридинкарбоновой кислоте. Показано, что образование комплекса IA-Car энергетически более выгодно, чем NA-Car и PA-Car. По-видимому, это связано с расположением атома азота в пиридиновом кольце.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, № 18-43-370018p\_a.*