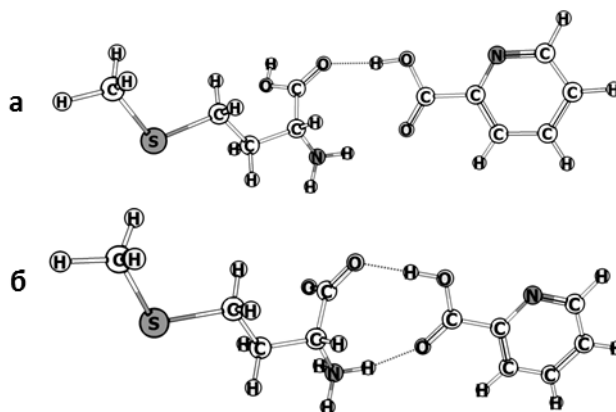


ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕТИОНИНА С ПИКОЛИНОВОЙ КИСЛОТОЙ ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Тюнина В.В., Дунаев А.М., Курицына А.А.

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

Моделирование и исследование взаимодействий различных биомолекул является первичным этапом при разработке инновационных лекарственных форм. Объектами данного исследования являются аминокислота L-метионин (Met) и пиколиновая кислота (РА). Квантово-химические расчеты выполнены в пакете программ Gaussian_03 методом теории функционала плотности ВЗLYP в комбинации с корреляционно-согласованным базисом cc-pVTZ. Учет влияния растворителя (вода) производился на основе модели РСМ. Соотношение компонентов в комплексе Met-РА принималось равным 1:1. Для обеих молекул взяты конформеры с наименьшей энергией на поверхности потенциальной энергии. Следует отметить, что при расчетах в вакууме метионин находился в молекулярной форме, а в растворителе – в цвиттер-ионной (см. рисунок).



Комплексы Met-РА в вакууме (а) и в растворителе (б)

Для полученного комплекса Met-РА проведена оптимизация его геометрии, NBO-анализ, получены энергии и частоты колебаний, структурные и молекулярные характеристики. Установлено, что между молекулами в комплексе возникают водородные связи: $O \cdots H-O$ в вакууме (рисунок, а), $O \cdots H-O$ и $C=O \cdots H$ в растворителе (рисунок, б). Две межмолекулярные связи упрочняют комплекс и понижают общую энергию.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-43-370018_p_a).