

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОЙ ИЗОМЕРИИ ДИПЕПТИДОВ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С МНОГОАТОМНЫМИ СПИРТАМИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Громова Н.М.⁽¹⁾, Межевой И.Н.⁽²⁾

⁽¹⁾ Ивановский государственный химико-технологический университет
153000, г. Иваново, Шереметевский пр., д. 7

⁽²⁾ Институт химии растворов РАН
153045, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1

Изучение взаимодействий между белками и полиспиртами необходимо для понимания механизмов конформационной устойчивости биополимеров в растворах. Однако довольно сложная структура белковых соединений делает затруднительным термодинамическое изучение этих взаимодействий. Поэтому довольно часто изучают взаимодействия небольших биомолекул (аминокислот, пептидов и т. д.) с компонентами раствора, которые отражают поведение белков в смешанных растворителях.

Методом калориметрии растворения измерены интегральные энтальпии растворения $\Delta_{\text{sol}}H^m$ DL- α -аланил-DL- α -аланина, DL- α -аланил- β -аланина и β -аланил- β -аланина в смесях воды с глицерином, этиленгликолем, 1,2-пропиленгликолем и 1,3-пропиленгликолем при концентрации соразтворителей до 0,42 м.д. Рассчитанные энтальпийные коэффициенты парных взаимодействий h_{xy} дипептидов с молекулами соразтворителей имеют положительные значения и увеличиваются в ряду: $\beta\text{-Ala-}\beta\text{-Ala} < \text{DL-}\alpha\text{-Ala-}\beta\text{-Ala} < \text{DL-}\alpha\text{-Ala-DL-}\alpha\text{-Ala}$. Более высокий h_{xy} для 1,2-пропиленгликоля по сравнению с этиленгликолем связан с наличием в молекуле дополнительной метильной группы, что содействует гидрофобной гидратации, проявляющейся в упрочнении водородных связей воды вокруг CH_3 -групп. Менее положительный h_{xy} для G-ol по сравнению с 1,2-PrD связан с замещением в молекуле 1,2-пропиленгликоля атома водорода метильной группы на полярную OH-группу, способную образовывать донорно-акцепторные связи.

Предложено корреляционное уравнение зависимости энтальпийных парных коэффициентов взаимодействия биомолекул h_{xy} от числа OH-групп в молекулах одно- и многоатомных спиртов. Обнаружено влияние стерических факторов и гидрофобных эффектов при взаимодействиях в трехкомпонентных системах. Проведен анализ влияния электростатической составляющей и структурных особенностей аминокислот и пептидов на энтальпийные параметры взаимодействия в водных растворах многоатомных спиртов.

Полученные термохимические параметры взаимодействия $\Delta_{\text{tr}}H^0$, h_{xy} дипептидов с исследованными органическими растворителями зависят в значительной степени от характера межмолекулярного взаимодействия (ион-биполярные, водородные связи), структурных особенностей соразтворителей и гидратации (дегидратации) веществ, гидрофобных эффектов в трехкомпонентной системе.