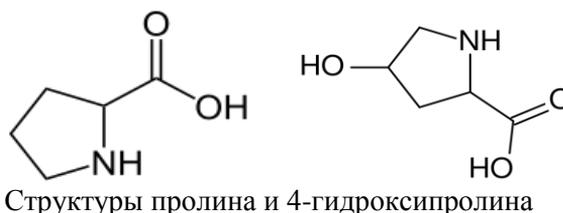


**ПРОЛИН И 4-ГИДРОКСИПРОЛИН:
МАСС-СПЕКТР, СУБЛИМАЦИЯ, СТРУКТУРА***Тюнина В.В., Краснов А.В., Гиричев Г.В.*Ивановский государственный химико-технологический университет
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

Гетероциклическая аминокислота пролин (Pro) и ее производная 4-гидроксипролин (Нур, см. рисунок) входят в состав белка соединительной ткани – коллагена, стабилизируют вторичную структуру полипролиновой спирали. Вследствие важной метаболической роли в организме, эти вещества представляют интерес для исследования их структурных и энергетических параметров.

Термодинамика сублимации экспериментально изучена эффузионным методом Кнудсена с масс-спектрометрическим контролем состава пара (МИ 1201, энергия ионизирующих электронов 50 эВ) в температурных интервалах 374-418 К для Pro и 424-479 К для Нур. Испарение препаратов происходило конгруэнтно, в масс-спектре не были обнаружены ионы, указывающие на разложение вещества.

Фрагментация изучаемых молекул под действием электронной ионизации немного отличается от традиционной для аминокислот. Она протекает по направлениям, характерным для циклических углеводов, и сопровождается раскрытием цикла с дальнейшим отщеплением алкена. Также следует отметить, что масс-спектр Нур более насыщен осколочными ионами по сравнению с Pro.



Отсутствие явлений гистерезиса и обработка температурных зависимостей ионных токов по второму закону термодинамики позволили определить энтальпии сублимации, которые изменяются в ряду: $\Delta_{\text{sub}}H^\circ(\text{Pro}) < \Delta_{\text{sub}}H^\circ(\text{Нур})$. Показано, что на энтальпию сублимации оказывает существенное влияние структурный фактор и межмолекулярные взаимодействия: введение гидроксильной группы в молекулу пролина приводит к увеличению энтальпии сублимации, вероятно, за счет возникновения дополнительных межмолекулярных водородных связей. Аналогичные закономерности ранее фиксировались для пары фенилаланин-тирозин и аланин-серин.

Проведены *ab initio* расчеты структурных параметров конформеров Pro и Нур. Определено влияние гидроксильной группы на геометрию пирролидинового цикла. Начаты расчеты межмолекулярных взаимодействий аминокислот.