

## ПРОТОЧНЫЕ СИНТЕЗЫ ОЛИГОПЕПТИДОВ ГЛИЦИНА С УЧАСТИЕМ ТРИМЕТАФОСФАТА НАТРИЯ

Серов Н.Ю., Штырлин В.Г., Хаяров Х.Р.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет,  
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18,  
e-mail: serov.nikita@gmail.com*

Одной из крупных и нерешенных проблем современной науки является пребиотический синтез пептидов. Для разработки данной проблемы ранее нами было проведено исследование кинетики образования олигопептидов в системе глицин – триметафосфат натрия – имидазол в водной среде при различных температурах и значениях pH, выявлено каталитическое действие имидазола, а также с помощью спектроскопии ЯМР  $^{31}\text{P}$  изучены превращения частиц, содержащих различные формы фосфора<sup>1,2</sup>.

Настоящая работа является продолжением упомянутых исследований и направлена на установление оптимальных условий образования олигопептидов в присутствии триметафосфата натрия, а также более детальное понимание механизма синтеза.

Синтезы выполнены на проточной системе ASIA-330 (Syrris). За кинетикой процессов следили с помощью ВЭЖХ-системы Knauer Smartline, а также по спектрам ЯМР, зарегистрированным на спектрометре Bruker Avance III 400. В качестве катализатора кроме имидазола использовались такие гетероциклические соединения, как N-метилимидазол, пиримидин и др.

По программе GAMESS<sup>3</sup> методом DFT на уровне CAM-B3LYP/TZVP с учетом эффектов среды в модели растворителя С-PCM были оптимизированы структуры реагентов, интермедиатов, продуктов реакций образования олигопептидов и некоторых переходных состояний.

В исследованных реакциях достигнуты довольно высокие выходы олигопептидов (до 52% для глицилглицина). Данные системы могут служить хорошими моделями пептидных синтезов в пребиотических условиях.

### Литература

1. Serov N.Yu, Shtyrilin V.G. EuropaCat XII. Catalysis: Balancing the use of fossil and renewable resources. European Congress on Catalysis, 2015, Kazan, 1931.
2. Serov N.Yu, Shtyrilin V.G., Khayarov Kh.R. Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements, 2016, 191, 1558.
3. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. J. Comput. Chem., 1993, 14, 1347.