

ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ В α -ГЛИЦИНЕ: РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Таланова И.О.,^б Волкова Т.Г.^а

^а*Ивановский государственный университет, 153025, Иваново, улица Ермака, 39,
e-mail: tgvolkova@yandex.ru*

^б*Ивановская государственная медицинская академия, 153012, Иваново,
Шереметевский проспект, 8*

В настоящее время все чаще для создания многих лекарственных препаратов используются аминокислоты и их производные. Это связано с безвредностью, отсутствием аллергизирующего влияния, а также с низкой выраженностью побочных эффектов данных соединений.¹ Для кристаллов аминокислот свойственен полиморфизм, поэтому востребованы умение предсказывать существование всех возможных полиморфных модификаций, а также актуальны разработки методов желаемых структур и предотвращения их неконтролируемого превращения в другие формы.² Так, например, для глицина характерны α -, β - и γ -модификации. В работе³ показано, как различаются по биологической активности α - и γ -формы: с разной временной динамикой блокируют спонтанную активность пирамидных нейронов, γ -глицин активнее влияет на транспорт наноразмерных частиц в мозг и т.д. β -Модификация глицина является метастабильной, но даже она проявляет биоактивность.⁴ В связи с этим изучение нестабильности водородных связей (Н-связей) в кристаллах аминокислот играет важную роль. При моделировании димера α -глицина⁵ величина энергии взаимодействия составила -58.28 ккал/моль и соответствовала двум сильным Н-связям. Моделирование фрагмента кристалла, состоящего из 5 и 6 молекул, показало⁶: образуются Н-связи внутри слоя и между слоями, и разница в энергиях является существенной, что говорит о возможности сохранения при растворении небольших кластеров.

Литература

1. Чекман И.С., Сырская А.О., Новикова И.В. и др. Аминокислоты – наноразмерные молекулы: клинично-лабораторные исследования. – Харьков, 2014. – 154 с.
2. Болдырева Е. Наука в России, 2014, 201, 26.
3. Achkasov A.F., Boldyreva E.V., Bukhtiyarov V.I. et al. Doklady Biochemistry and Biophysics, 2014, 454, 6.
4. Зевак Е.Г., Огиенко А.Г., Болдырева Е.В. и др. Нанотехнологии и охрана здоровья, 2013, 5, 30.
5. Лысенко А.А., Волкова Т.Г. Бутлеровские сообщения, 2018, 53, 91.
6. Лысенко А.А., Калмыков П.А., Гиричева Н.И., Волкова Т.Г., Белкина Е.Г. Бутлеровские сообщения, 2019, 57, 21.