

ИК СПЕКТРОСКОПИЯ АДДУКТА ЛЕГКОГО ФУЛЛЕРЕНА И АМИНОКИСЛОТЫ. C₆₀-ЛИЗИН

Аббас Р.,^{а,б} Изотова С.Г.^а

^аСанкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Московский проспект 26, Санкт-Петербург, 190013, Россия,
e-mail: rashad88abbas@gmail.com

^бУниверситет Аль-Баас, Хомс, 77, Сирийская Арабская Республика

Вследствие биологической активности аминокислотные производные фуллерена C₆₀ (AADF) считаются перспективными для широкого круга биохимических систем, в том числе в качестве физиологически активных синтетических соединений.^{1,2} В то же время определение характера взаимодействия аминокислот с фуллеренами представляет интерес в плане выяснения природы биологических и молекулярно-специфических взаимодействий.³

В данной работе проведено сопоставление и анализ экспериментальных и теоретических колебательных спектров аддуктов C₆₀-лизина.

Экспериментальные ИК спектры твердофазных образцов лизина, фуллерена и аддукта измерены на ИК-Фурье спектрофотометре Shimadzu IRTracer-100 в диапазоне 400-4000 см⁻¹ в таблетках с KBr. Теоретические колебательные спектры для геометрически оптимизированных модельных структур лизина, фуллерена и аддуктов с разными вариантами координации лизина к фуллерену получены посредством квантово-химических расчетов в программном пакете Gaussian 09 методом функционала плотности в приближении B3LYP с базисными наборами 6-31G(d), 6-31G(d,p) и 6-311G(d,p) с добавлением и без диффузных функций.

По результатам анализа полученных данных определены активные в ИК и КР колебания, выполнено отнесение полос экспериментального спектра, определены положения колебаний, ответственных за координацию. Обсуждаются особенности проявления разных вариантов координации в ИК спектрах.

Литература

1. Dolinina, T. Y.; Luzhkov, V. B. Russian Chemical Bulletin 2012, 61(8), 1631.
2. Luzhkov, V. B.; Romanova, V. S.; Kotelnikov, A. I. Russian Chemical Bulletin 2014, 63(3), 567.
3. Leon, A. de.; Jalbout, A. F.; Basiuk, V. A. Chemical Physics Letters 2008, 452(4-6), 306.