

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ КОНФОРМАЦИОННЫЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУР 20 ПРОТЕИНОГЕННЫХ L-АМИНОКИСЛОТ И ИХ КРЕМНИЕВЫХ АНАЛОГОВ

Щербаков К.А., Кабанов А.В.¹, Комаров В.М.¹, Кондратьев М.С.¹

Марийский государственный университет, Россия, 424000, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина
1, email: kirill.soff@gmail.com

¹Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, г.Пушино, ул. Институтская 3

Соединения кремния представляют собой особый интерес при создании теорий, описывающих альтернативные формы жизни. Связать это можно с тем, что кремний и углерод имеют схожее строение валентных электронных оболочек их атомов. Исходя из этого, можно предположить, что кремний способен служить основой для формирования сложных, разветвлённых молекул.

В связи с этим особый интерес представляет изучение кремниевых аналогов известных биомолекул. Объектом исследования послужили кремниевые аналоги 20 протеиногенных аминокислот. Целью исследования являлся поиск наиболее стабильных конформеров этих соединений. При помощи пакета МОРАС6 и полуэмперической параметризации РМ3 нам удалось получить оптимизированные структуры 20 протеиногенных аминокислот и их кремниевых аналогов. Для соединений кремния метод РМ3 показал недостаточную приемлемость: некоторые валентные углы при оптимизации становились острыми. По этой причине найденные минимумы были пересчитаны в пакете МОРАС 2012 с использованием параметризации РМ7 [1].

Проведенный ранее анализ энергетических минимумов углеродных и кремниевых аминокислот, рассчитанных в РМ3, показал, что большинство кремниевых аминокислот характеризуются более выраженной термодинамической стабильностью [2]. Использование параметризации РМ7 продемонстрировало, что отрицательные экстремумы теплот образования кремниевых аминокислот оказались более выраженными, чем эти же величины для углеродных. Оптимизация структур кремниевых аминокислот с использованием РМ7, позволила получить для них более реалистичную геометрию, по этой причине параметризация РМ7 представляется более предпочтительной для этого класса соединений.

Литература

1. Stewart J. J. P., Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters J. Mol. Modeling 19, 1-32 (2013).

2. Kondratyev M.S., Kabanov A.V., Samchenko A.A., Komarov V.M., Khechinashvili N.N. // Possible extraterrestrial life: A quantum-chemical look on the silicon analogs of carbon biomolecules. JBSD, Albany 2013 Conversation 18. June 11-15 2013.