

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ДВУХ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ МОЛЕКУЛЫ КАРНОЗИНА МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

С.Д.Демухамедова, З.И.Гаджиев

Бакинский Государственный Университет, Институт Физических проблем

Молекула карнозина представляет собой природный дипептид, состоящий из двух аминокислотных остатков - β -аланина и L-гистидина. Благодаря своим ярко выраженным антиоксидантным свойствам карнозин в организме человека выполняет важные физиологические функции, а также препятствует процессу старения. На основе карнозина, его производных и комплексов с различными переходными металлами, создаются новые лекарственные препараты, что подтверждает актуальность изучения структуры этих соединений.

В данной работе при помощи теоретического моделирования, используя неэмпирические методы квантовой химии, исследовано пространственное и

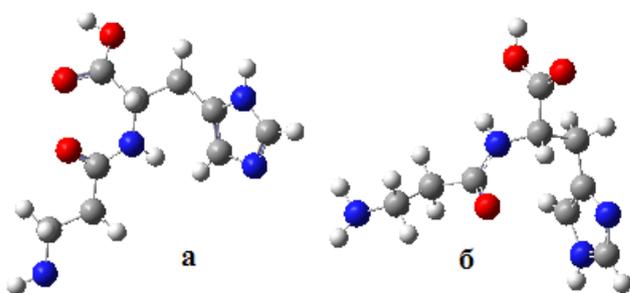


Рис. Расчетные модели карнозина N¹H (а) и N³H (б)

электронное строение, а также ИК и Раман спектры двух таутомерных форм карнозина (рис.).

Квантовохимический расчет был проведен по программе Gaussian-03 методом функционала плотности B3LYP с использованием базиса 6-31G+.

Проанализированы полученные частоты нормальных колебаний и интенсивности активных полос ИК и Раман спектров таутомеров карнозина. Анализ распределения потенциальной энергии рассчитанных теоретических колебательных спектров таутомерных форм карнозина N¹H и N³H был проведен с помощью программы VEDA4, которая использует в качестве входных данных файлы из уже проведенного расчета по программе Gaussian-03 и удобна для более точной интерпретации результатов расчета колебательных спектров молекул.