

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ЦВИТТЕР-ИОННОЙ ФОРМЫ АЛАНИНА

Д.М. Кадров*, Г.Н. Тен*, В.И. Баранов**

* Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,

** Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН

В данной работе выполнен расчёт ИК спектра цвиттер-ионной формы аланина и рассмотрено влияние водородных и электростатических сил на колебательный спектр водного раствора аланина.

Расчёт колебательных спектров аланина в водном растворе был выполнен методом DFT двумя способами. Первый способ заключался в использовании модели реактивного поля (диэлектрическая проницаемость $\epsilon=78.39$, модель SCRF). Второй способ состоял в непосредственном учёте влияние водородной связи путём расчёта межмолекулярных комплексов индола с молекулами воды (1:1, 1:3, 1:5).

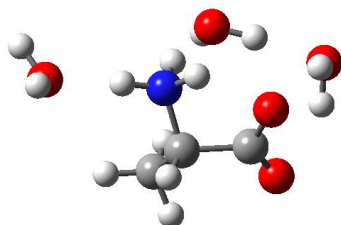


Рис. Комплекс цвиттер-ионной формы аланина с тремя молекулами воды

Из анализа вычисленных колебательных спектров и их сравнения с экспериментом следует, что хорошее частотное согласие с экспериментом наблюдается в случае использования модели SCRF (1), а интенсивности полос поглощения лучше воспроизводятся при расчёте комплексов аланина с водой (2). При этом соответственно происходит увеличение (в 2-3 раза) интенсивности полос поглощения (1) и значительный (до 100 см^{-1}) сдвиг частот колебаний (2), форма которых отвечает колебаниям цвиттер-ионной группы (валентные колебания NH_3^+ и CO^-). Такие характерные изменения указывают на наличие более слабых водородных связей, чем при образовании водородных связей $\text{NH}\dots\text{O}$ и $\text{CO}\dots\text{H}$ в комплексе канонических конформеров аланина с водой.