

## ВЛИЯНИЕ ВОДЫ НА СТРУКТУРУ ЦВИТТЕР-ИОННОЙ ФОРМЫ L-ТРИПТОФАНА В $^1L_b$ И $^1L_a$ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ

<sup>1</sup> Тен Г.Н., <sup>2</sup> Щербакова Н.Е., <sup>3</sup> Баранов В.И.

<sup>1</sup> Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов

<sup>2</sup> Российский научно-исследовательский противочумной институт «Микроб», Саратов

<sup>3</sup> Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва

<sup>1</sup> Тен Г.Н.,  
<sup>2</sup> Щербакова Н.Е.,  
<sup>3</sup> Баранов В.И.  
<sup>1</sup> Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,  
<sup>2</sup> Российский научно-исследовательский противочумной институт «Микроб»  
<sup>3</sup> Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН

Важнейшей средой любой аминокислоты является водный раствор, в котором аминокислоты в полном соответствии со своей амфотерной природой имеют при рН=7 цвиттер-ионную форму. Известно, что ароматические аминокислоты поглощают в УФ области; среди них Трп обладает наиболее сильной флуоресценцией [1]. Для расчёта электронно-колебательных спектров необходимо знание структуры молекулы в комбинирующих – основном и возбуждённом – электронных состояниях.

В данной работе было определено влияние воды, расположенной между биполярными группами (рис.), на геометрические параметры Трп в первых двух электронно-возбуждённых состояниях. Структурные модели были построены с помощью программы Gaussian-09 с набором базисных функций 6-31g(d,p) [2].

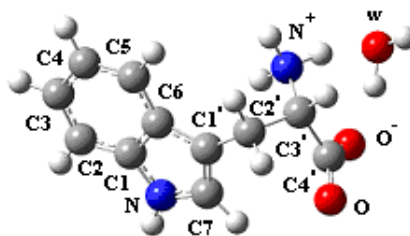


Рис. Молекулярная структура L-Триптофана (Trp)

В табл. приведены некоторые вычисленные значения длин связей  $l$  (Å) и валентных углов  $\alpha$  (град) комплекса Трп с молекулой воды (Trp:1w) в основном состоянии и их изменения ( $\Delta l = l_{очн} - l_{возб}$ ,  $\times 10^{-3}$  Å;  $\Delta \alpha = \alpha_{очн} - \alpha_{возб}$ , град) при переходе в первое (1)  $^1L_b$  и второе (2)  $^1L_a$  пл\* электронно-возбуждённые состояния.

Связь	Trp:1w		
	$l$	$\Delta l_1$	$\Delta l_2$
C <sub>1</sub> C <sub>2</sub>	1.400	-4	24
C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	1.390	60	23
C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	1.412	-29	25
C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	1.389	42	37
C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	1.408	24	25
C <sub>6</sub> C <sub>1</sub>	1.425	-20	49
NC <sub>1</sub>	1.378	35	-4
NC <sub>7</sub>	1.377	-38	36
C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> '	1.445	-9	-16
C <sub>7</sub> C <sub>1</sub> '	1.379	66	28

Показано, что определяющую роль в формировании колебательной структуры электронно-колебательных спектров Трп играет угол поворота индольного фрагмента относительно присоединяемого к нему фрагмента аланина.

### Литература

1. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986. 496 с.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.