

ВЛИЯНИЕ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМИНОКИСЛОТНЫХ СИСТЕМ

Бурлакова А. А.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук,

PhD Мельчакова Ю. А.

Университет ИТМО

arina.burlakova04@gmail.com

Введение

Сложные молекулярные системы характеризуются наличием широкого спектра нековалентных взаимодействий, включая водородные, электростатические и ван-дер-ваальсовы силы. Отдельные ван-дер-ваальсовы контакты имеют сравнительно малую энергию, однако их суммарное действие может существенно влиять на геометрию, энергетическую стабильность, распределение электронной плотности и колебательные характеристики молекул, особенно при наличии в системах неполярных и высокополяризуемых фрагментов [1]. Корректное описание дисперсионных взаимодействий является важным условием репрезентативности используемой теоретической модели. Актуальность работы обусловлена необходимостью количественного анализа вклада ван-дер-ваальсовых взаимодействий на различных уровнях организации аминокислотных систем, включая отдельные аминокислоты и их нековалентные смеси. Такой анализ представляет интерес как с фундаментальной точки зрения, так и в прикладном аспекте: рассчитанные квантово-химические характеристики могут быть использованы в качестве эталонных данных для обучения моделей машинного обучения, направленных на предсказание свойств сложных биомолекулярных систем, расчет которых является ресурсоемким для прямого *ab initio* моделирования [2]. Хотя различные дисперсионные поправки широко используются в квантово-химических расчетах для более корректного описания нековалентных взаимодействий, в литературе отсутствует согласованный количественный анализ их вклада в структуру и спектральные характеристики аминокислотных ассоциатов, выполненный в рамках единой расчетной методики на сопоставимом наборе модельных систем.

Основная часть

В качестве объектов исследования выбраны протогенные аминокислоты аланин, глутамин, гистидин и метионин, рассмотренные в виде мономеров и бинарных ассоциатов. Эти молекулы представляют собой репрезентативный набор с различными типами боковых цепей, позволяющий проследить влияние природы функциональных групп на степень проявления ван-дер-ваальсовых взаимодействий в свойствах системы [3]. Квантово-химическое моделирование проводилось методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала B3LYP и базисного набора 6-31G**, что позволило наиболее точно оценить электронный обмен и корреляцию в рассмотренных случаях с неподделенной парой азота и свободной p-орбиталью [4]. Расчеты проводились как без учета дисперсии, так и с применением эмпирической дисперсионной коррекции Grimme D3. Для систем выполнены оптимизация геометрии, расчет полной энергии, распределения зарядов, дипольных моментов, инфракрасных и рамановских спектров.

Выводы

Установлено, что учет ван-дер-ваальсовых взаимодействий приводит к дополнительной стабилизации нековалентных аминокислотных ассоциатов. Показано, что вклад дисперсионных взаимодействий существенно зависит от ориентации вектора дипольного момента относительно молекулярного каркаса, что определяет характер перераспределения электронной плотности. Учет дисперсии отражается в изменении колебательных спектров, приводя к систематическим сдвигам частот и неаддитивности спектров ассоциатов. Полученные результаты подчеркивают необходимость учета ван-дер-ваальсовых эффектов при квантово-химическом моделировании и могут быть использованы при интерпретации экспериментальных спектров и разработке моделей машинного обучения.

Литература

1. Каданцев В. Н. Биофизические основы взаимодействия живых систем: учебно-метод. пособие. // Издательство Юрайт. 2026. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://urait.ru/bcode/589198> (Дата обращения 19.02.2026).
2. Karpov K., Mitrofanov A., Korolev V., Tkachenko V. Size Doesn't Matter: Predicting Physico- or Biochemical Properties Based on Dozens of Molecules // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2021. Vol. 12, no. 38. P. 9213–9219. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c02477>.
3. Лукьянова Ю. М., Мацулевич Ж. В., Борисов А. В. Элементы биохимии в курсе органической химии: учебно-метод. пособие. // Нижегородский государственный технический университет им. П. Е. Алексеева. 2024.
4. Hamid F. Overview on Computational Chemistry // *International Journal of Research in Engineering and Innovation*. 2021. P. 397–402. <https://doi.org/10.36037/IJREI.2021.5608>.