

Саратовский национальный исследовательский государственный
университет имени Н. Г. Чернышевского

Г. Н. Тен, Н. Е. Щербакова, В. И. Баранов

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ
ОСНОВНЫХ АМИНОКИСЛОТ
В РАЗНЫХ ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Саратов
Издательство Саратовского университета
2017

УДК 539.194+543.424
ББК 22.36
Т33

Тен, Г. Н.

Т33 Колебательные спектры основных аминокислот в разных фазовых состояниях / Г. Н. Тен, Н. Е. Щербакова, В. И. Баранов. – Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2017. – 188 с. : ил.

ISBN 978-5-292-04465-9

В монографии рассмотрены вопросы определения конформационного состава незаряженных конформеров основных аминокислот в газовой фазе и влияние водородных связей на колебательные спектры цвиттер-ионных форм в конденсированных состояниях. Представлены результаты расчёта колебательных спектров (ИК и КР) для водного раствора при разных значениях рН. Выполнена интерпретация колебательных спектров и проведено сравнение с экспериментом.

Для преподавателей и научных работников, студентов и аспирантов, специализирующихся в области биофизики, молекулярной спектроскопии и квантовой биохимии.

Табл. 32. Ил. 76. Библиогр.: 181 назв.

The book covers the problems of determining the conformational composition of uncharged conformers of basic amino acids in the gas phase and the effect of hydrogen bonds on the vibrational spectra of zwitterionic forms in condensed states. The results of calculation of vibrational (IR and RAMAN) spectra of amino acids for aqueous solution at different pH values are presented. The vibrational spectra are interpreted and compared to the experiment.

The monograph is intended for teachers and researchers, students and postgraduate students specializing in biophysics, molecular spectroscopy and quantum biochemistry.

Рецензент:

доктор физико-математических наук, профессор *В. А. Дементьев*
(ГЕОХИ им. В. И. Вернадского РАН, Москва)

*Работа издана по тематическому плану 2017 года
(утвержден Ученым советом Саратовского национального исследовательского
государственного университета имени Н. Г. Чернышевского,
протокол № 3 от 21 февраля 2017 г.)*

УДК 539.194+543.424
ББК 22.36

ISBN 978-5-292-04465-9

© Тен Г. Н., Щербакова Н. Е., Баранов В. И., 2017
© Саратовский университет, 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	11
Глава 1. Классификация основных аминокислот и методы исследования колебательных спектров в разных фазовых состояниях	13
1.1. Некоторые важнейшие свойства аминокислот. Классификация	14
1.1.1. Классификация аминокислот по строению радикала R . . .	15
1.1.2. Классификация по оптической активности	16
1.1.3. Классификация по полярности радикалов	17
1.1.4. Изoeлектрическая точка	20
1.2. Хронология исследования колебательных спектров аминокислот	22
1.2.1. Колебательные спектры кристаллов и водных растворов аминокислот	23
1.2.2. Экспериментальные ИК спектры аминокислот	23
1.2.3. Применение спектроскопии КР	25
1.2.4. Исследование конформаций аминокислот в конденсированных состояниях и газовой фазе	27
1.3. Хронология результатов расчёта колебательных спектров аминокислот	28
1.3.1. Расчёт нормальных колебаний аминокислот полуэмпирическими методами	28
1.3.2. Расчёт нормальных колебаний аминокислот неэмпирическими методами	29
1.3.3. Определение конформационного состава аминокислот . .	31
1.4. Некоторые актуальные вопросы исследования аминокислот в разных фазовых состояниях	33
1.4.1. Исследования колебательных спектров аминокислот в твёрдой фазе	34
1.4.1.1. Определение разного типа изомеров	34
1.4.1.2. Исследование гибридных структур	37
1.4.1.3. Влияние температуры на колебательные спектры аминокислот	42
1.4.1.4. Исследование аминокислот в низкочастотной области	45

1.4.2. Исследования колебательных спектров аминокислот в водном растворе	48
1.4.2.1. Влияние pH раствора на структуру и колебательные спектры аминокислот	48
1.4.2.2. Исследование комплексов аминокислот с молекулами воды	51
1.4.3. Применение спектров КР и РКР для интерпретации колебательных спектров аминокислот и белков	52
1.4.4. Экспериментальное исследование колебательных спектров аминокислот в газовой фазе	55
1.4.5. Квантово-химическое исследование колебательных спектров аминокислот в разных фазовых состояниях	57
1.4.5.1. Определение конформационного состава	57
1.4.5.2. Исследование механизма изомерного превращения аминокислот	62
Список литературы к главе 1	63
Глава 2. Колебательные спектры незаряженных аминокислот	70
2.1. Глицин	71
2.1.1. Роль Gly в образовании коллагена	71
2.1.2. Структура и энергия конформеров Gly в изолированном состоянии	71
2.1.3. Интерпретация низкотемпературного ($T=13$ К) ИК спектра смеси незаряженных форм Gly	74
2.1.4. Определение конформационного состава незаряженных структурных форм глицина по низкочастотным спектрам КР в газовой фазе ($T=395$ К)	81
2.1.5. Определение конформационного состава незаряженных структурных форм Gly по ИК спектрам в газовой фазе при $T=520$ К	83
2.2. Аланин	90
2.2.1. Определение конформационного состава Ala в газовой фазе при $T=520$ К	90
2.3. Метионин и N-формилметионин	100
2.3.1. Роль метионина и N-формилметионина в синтезе белка	100
2.3.2. Интерпретация колебательных спектров незаряженных конформеров метионина и N-формилметионина	101

2.4. Цистеин и селеноцистеин	107
2.4.1. Роль Cys и селеноцистеина в формировании структуры белков	107
2.4.2. Влияние L- и D-формы на колебательные спектры цистеина и селеноцистеина	109
Список литературы к главе 2	115
Глава 3. Колебательные спектры цвиттер-ионных форм аминокислот в водном растворе	118
3.1. Алифатические α -аминокислоты	118
3.1.1. Глицин	120
3.1.2. Аланин	121
3.1.3. Валин	123
3.1.4. Лейцин и Изолейцин	124
3.2. Ароматические аминокислоты	127
3.3. Основные аминокислоты	132
3.3.1. Лизин	134
3.3.2. Аргинин	138
3.4. Дикарбоновые аминокислоты	141
3.4.1. Аспарагиновая кислота	143
3.4.2. Глутаминовая аминокислота	148
Список литературы к главе 3	155
Глава 4. Колебательные спектры цвиттер-ионных форм аминокислот в твёрдом состоянии	158
4.1. Глицин и аланин	159
4.1.1. Влияние водородных связей на структуру Gly и Ala	160
4.1.2. Влияние межмолекулярной водородной связи, образованной биполярными группами с молекулой воды, на колебательные спектры цвиттер-ионных форм Gly и Ala	162
4.2. Цистеин	167
4.3. Триптофан	171
4.3.1. Колебательные спектры Trp в конденсированных состояниях	172
Список литературы к главе 4	183
Заключение	186