

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКАНОНИЧЕСКИХ АМИНОКИСЛОТ

Бадалов А.А., Юртаева А.М.<sup>1</sup>, Комаров В.М., Кондратьев М.С.

Институт биофизики клетки РАН, aa-badalov1@mail.ru

<sup>1</sup>Воронежский государственный университет

Неканонические аминокислоты отличаются от обычных аминокислот тем, что они напрямую не кодируются ДНК и обладают уникальными химическими и биологическими свойствами. Научные исследования, направленные на изучение квантово-химических параметров неканонических аминокислот (НКА), представляют собой важный шаг в области биохимии и фармакологии. В нашем исследовании мы сосредоточились на определении геометрических и термодинамических параметров этих молекул, что может открыть новые горизонты в создании лекарств и биоматериалов.

В работе использовался современный квантово-химический пакет МОРАС, с параметризацией PM7. Объектами исследования стали изолированные неканонические аминокислоты: 4-аминобензойная кислота, 4-гидроксипролин, Азетидин-2-карбоновая кислота, Аллотреонин, Бэта -аланин, Гипузин, Гомонорлейцин, Дегидроаланин, десмозин, изосерин, Канаванин, Карбоксиглутаминовая кислота, Кискваловая кислота, Лантионин, норвалин, Норлейцин, Орнитин, Пипеколиновая кислота, Пироглутаминовая кислота, Цистатианин.

В рамках расчетов PM7 нами были определены ключевые параметры, включая длины связей, электронную плотность, дипольные моменты и щели между верхней заполненной молекулярной орбиталью (НОМО) и нижней вакантной молекулярной орбиталью (LUMO). Несмотря на крайне скудные имеющиеся экспериментальные данные, подтверждающие наши расчеты, мы получили ценные данные, которые могут служить основой для будущих исследований. Основные результаты нашего исследования показали, что некоторые неканонические аминокислоты обладают уникальными свойствами электронной структуры, которые потенциально делают их эффективными для взаимодействия с белками, нуклеиновыми кислотами и другими макромолекулами и ансамблями.