

КОМБИНИРОВАННЫЙ ПОДХОД К КОНФОРМАЦИОННОМУ АНАЛИЗУ ПОДАНДОВ С ДЛИННОЙ ЦЕПЬЮ НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ЯМР И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

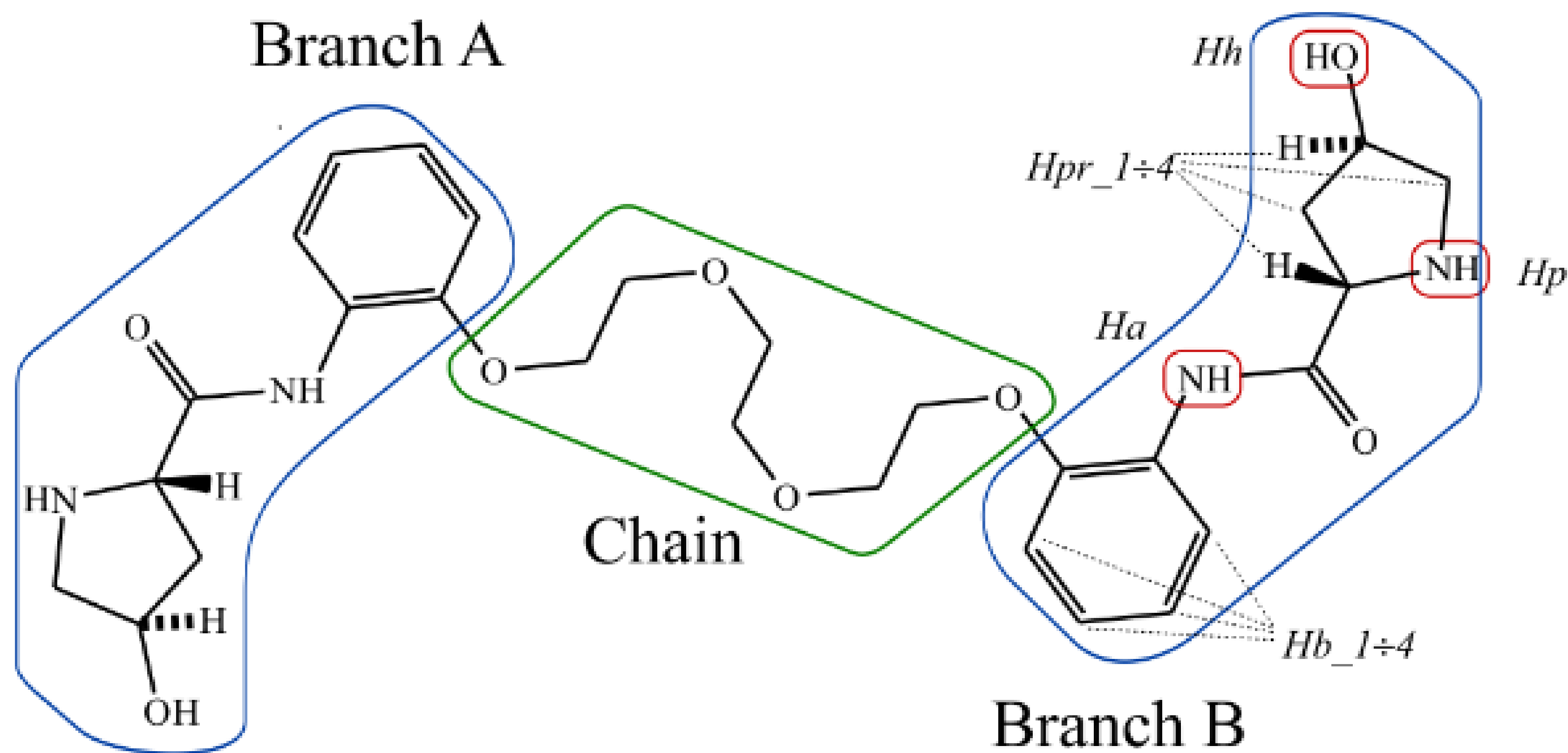
Е. Барташевич^{1,2}, Г. Макаров¹, О. Бородина¹, А. Масунов^{1,2}, И. Овчинникова³, Ю. Титова^{3,4}, О. Федорова³



¹Южно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, bartashevichev@susu.ru

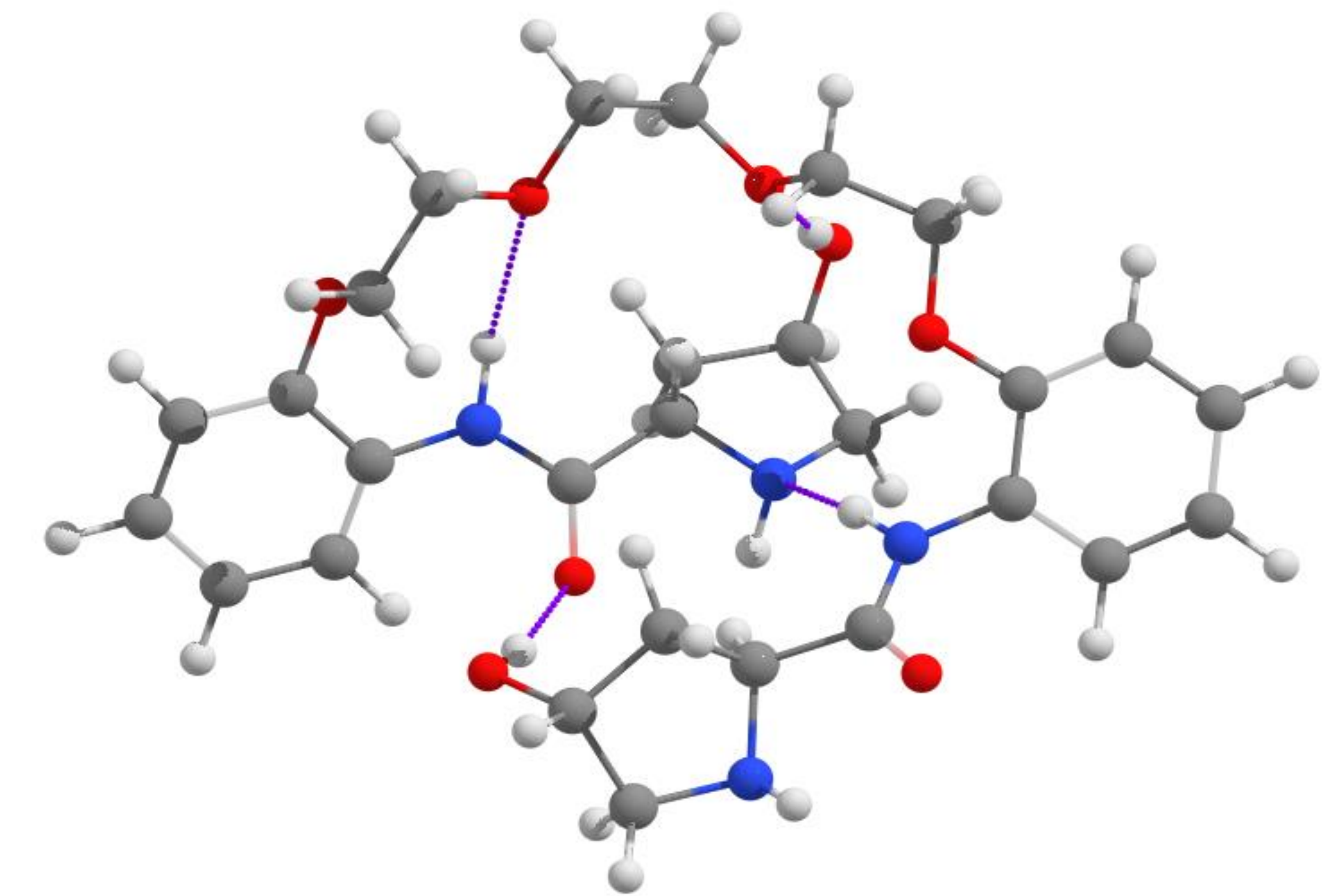
²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, titova@ios.uran.ru

³УрО РАН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, г. Екатеринбург, fedorova@ios.uran.ru

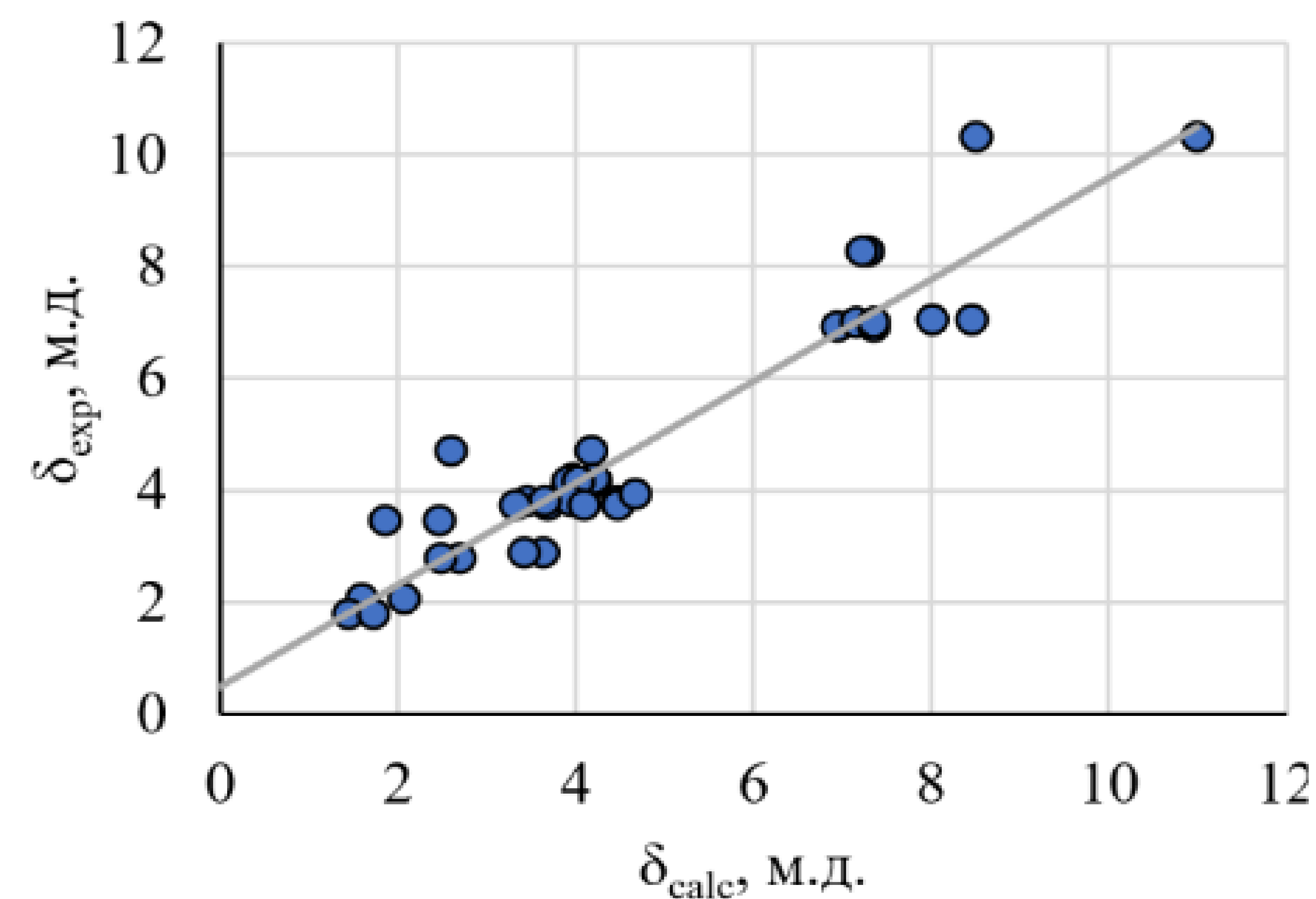


Для выявления структурных особенностей (2S,4R)-4-гидроксипролинсодержащего поданда с полиэфирной цепочкой с 4 атомами кислорода предложен комбинированный подход генерирования и отбора конформационных состояний.

В основе теоретического подхода генерирования конформеров лежат методы уравновешенной метадинамики с обменом потенциалами.



- ✓ Генерировалось множество возможных конформаций поданда, затем направленно отбирались наиболее вероятные конформеры.
- ✓ Для каждого конформера ключевой выборки вычислялись химические сдвиги атомов ¹H ЯМР (δ_{calc}) и сравнивались с экспериментальными данными (δ_{exp}).
- ✓ Анализировалось влияние экранирующих и дезэкранирующих вкладов акцепторов Н-связей.



Лучшее согласие эксперимент-расчет достигается для конформеров с “изогнутой” формой полиэфирной цепочки, где реализуются следующие условия:

- 1) торсионные углы Н–N–C–C и N–C–C–N < 30° и присутствуют внутримолекулярные Н-связи O–H_h...O_h;
- 2) угол N–C–C–N > 150° и есть внутримолекулярные водородные связи N–H_a...N_p или O–H_h...N_p;
- 3) акцепторы водородных связей “веток” не должны образовывать Н-связи с атомами полиэфирной цепи.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания АААА-А19-119011790134-1

с использованием оборудования Центра коллективного пользования ИОС УрО РАН «Спектроскопия и анализ органических соединений» (ЦКП «САОС»)