

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРЕМНИЕВЫХ АНАЛОГОВ МОЛЕКУЛ АМИНОКИСЛОТ

Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Комаров В.М.

Учреждение Российской академии наук Институт биофизики клетки РАН, Россия  
142290, г. Пущино, ул. Институтская, 3, тел. 8(4967)73-94-04  
E-mail: ma-ko@bk.ru

Вопрос об уникальности жизни, существующей на нашей планете, обсуждается в литературе уже не одно десятилетие. За это время было установлено, что даже в межзвёздной среде, при всём разнообразии молекул, которые были там обнаружены, 84 основаны на углероде, а 8 - на кремнии [Lazio], в том числе четыре из них являются гибридными, т.е. в их состав входит как кремний, так и углерод. Интересно, что по приблизительным подсчётам, в космосе соотношение углерода к кремнию составляет 10 к 1, хотя земная кора на 87% состоит как раз из кремния. Кремний в целом считается наиболее вероятным кандидатом на роль структурообразующего атома в «альтернативной биохимии»: он находится в той же группе периодической таблицы, что и углерод, эти два элемента во многом схожи по строению своих валентных электронных оболочек. Несмотря на то, что атомы кремния имеют бóльшую массу и радиус, они, тем не менее, образуют двойную и тройную ковалентную связь, а потому вопрос о гипотетических биохимических процессах, в которых могут принимать участие соединения, являющимися кремниевыми аналогами аминокислот, углеводов, белков, липидов и других, привычных для нас биомолекул остается предметом дискуссии. При этом современные методы вычислительной химии позволяют весьма эффективно провести оценочные расчеты некоторых таких соединений.

Ранее было постулировано [Lazio], что соединения кремния не настолько разнообразны по строению, как белки. В данной работе теоретически изучены особенности некоторых структурных и термодинамических параметров молекул, которые могут рассматриваться полными кремниевыми аналогами L-аминокислот, а также их гибридных форм (когда имеются только карбонильный и C<sup>α</sup>-углероды, а остальные заменены на атомы кремния).

Выполненные нами квантово-химические PM3-расчеты и расчеты по методу *ab initio* показали, что молекулы «кремниевых аминокислот» характеризуются бóльшей термодинамической стабильностью (которая оценивалась по величинам теплот образования), нежели их углеродные аналоги, и гибридные молекулы. При этом «кремниевые аминокислоты» обладают увеличенными значениями дипольных моментов, а также характеризуются более выраженными электроно-донорными свойствами (отражением чего являются пониженные величины потенциала ионизации). Значительное внимание в работе уделено обсуждению вопроса о существовании и стабильности «альфа-спиралей» из кремниевых и гибридных аминокислот, поскольку в молекулах Si-аналогов аспартата и глутамата нами было обнаружено эффективное образование внутримолекулярной водородной связи (за счет боковой группы), которая у природных L-аминокислот оказалась важной для образования альфа-спиралей [Кондратьев и соавт].