УДК: 544.163.2

Матус Яна Александровна

**ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ α-АМИНОАЛЬДЕГИДОВ, ПРОИЗВОДНЫХ КИСЛЫХ α-АМИНОКИСЛОТ**

Руководители: Н.П. Русакова, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии молекул глутаминовой кислоты (1), аспарагиновой кислоты (2), 2-амино-4-карбобутаналя (1ꞌ) и 2-амино-3-карбопропаналя (2ꞌ), обладающих общей структурной формулой H2N‒C(C(O)OH)H‒CH2‒R и H2N‒C(C(O)H)H‒CH2‒R, где R= CH2‒C(O)OH (1, 1*ꞌ*) и C(O)OH (2, 2*ꞌ*) осуществлена методом B3LYP [1] Заряды групп (*q*(*R*)) и шкала групповых электроотрицательностей (χ(*R*)) соединений 1, 2, 1*ꞌ* и 2*ꞌ* получены с использованием «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) [2]. Структурная перестановка в α-АМК (1,2) позволяет сравнить их *q*(*R*) (Таблица) с аналогичными *q*(*R*) α-аминоальдегидов (1*ꞌ*, 2*ꞌ*) и составить общую шкалу χ(*R*).

Функциональные группы NH2 и СООН (с отрицательным зарядом) стягивают часть электронной плотности с соседних групп в свой атомный бассейн. Параметр *q*(*R*) соответствующего заместителя в 1*ꞌ*, 2*ꞌ* немного ниже, чем в 1, 2. На *q*(CH2) оказывают влияние оба концевых фрагмента, обладающих отрицательной величиной *q*(*R*), что является результатом убывания электронной плотности в сторону данных *R* с CH2.

*Таблица:*

*Заряды групп q*(*R*)\**молекул α-АМК (1,2) и α-аминоальдегидом (1ꞌ, 2ꞌ) в а.е.*

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *q*(*R*)*, в а.е* | | | | | | |
|  | COOH | CH | NH2 | CH2 | *R* | *R* |
| 1 | -0,185 | 0,418 | -0,296 | 0,111 | -0,048 | CH2C(O)OH |
| 2 | -0,160 | 0,447 | -0,291 | 0,147 | -0,144 | COOH |
|  | COH | CH | NH2 | CH2 | *R* | *R* |
| 1ꞌ | -0,120 | 0,375 | -0,301 | 0,098 | -0,051 | CH2C(O)OH |
| 2ꞌ | -0,069 | 0,402 | -0,302 | 0,128 | -0,159 | COOH |

Построение общей шкалы *χ*(*R*) молекул 1, 2, 1*ꞌ* и 2*ꞌ* проведено составлением соотношений *χ*(*R*) для каждой молекулы из сопоставления *q*(*R*), затем выполнены объединение и унификация индивидуальных шкал *χ*(*R*) по одному заместителю:

*χ*(H2N‒C(C(O)H)H) < χ(CH2COOH)< *χ*(H2N‒C(C(O)OH)H) < <χ(COOH)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2007.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.