

УДК 544.165

АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ ГРУПП СУЛЬФИНОВЫХ КИСЛОТ

Н.П. Русакова¹, В.В. Туровцев^{1,2}, Ю.Д. Орлов¹

Тверского государственного университета

¹Кафедра общей физики

Тверская государственная медицинская академия

²Кафедра физики, математики и медицинской информатики

В работе в рамках «квантовой теории атомов в молекуле» (QТАИМ) проведен анализ внутримолекулярных взаимодействий в гетероатомных органических соединениях, содержащих S^{IV} и O, составлен ряд электроотрицательностей (χ) функциональных групп для сульфидных кислот C_nH_{2n+2}SO₂, где $n \leq 10$.

Ключевые слова: QSAR и QSPR, внутримолекулярные взаимодействия, электроотрицательность, электронная плотность, квантовая теория атомов в молекулах, сульфидные кислоты.

Изучение электронной плотности ($\rho(r)$) соединений в рамках QТАИМ [2] позволяет представить молекулу в виде совокупности «эффективных» атомов (Ω) и ввести для них заряд ($q(\Omega)$), энергию ($E(\Omega)$) и объём ($V(\Omega)$). В моделях, построенных на количественных корреляциях «структура–активность» (QSAR) и «структура–свойство» (QSPR), в задачах «drug design», атомные заряды используются как дескрипторы, связанные с биологической активностью [1], термодинамическими свойствами [15–17] и т. д. В отсутствие перераспределения электронной плотности $q(\Omega)$ равен нулю. Поляризации $\rho(r)$ атомов Ω определяет характер переноса заряда $q(\Omega)$ между атомами [2] (индуктивный эффект – I-эффект). Предсказание I-эффекта в молекуле основано на использовании шкалы электроотрицательностей χ атомов и групп (R). I-эффект и связанное с ним понятие χ применяются как для качественного, так и для количественного описания внутримолекулярных взаимодействий [3–6]. Корректный учет внутримолекулярных взаимодействий позволяет минимизировать погрешность рассматриваемых свойств молекулы, что приводит к улучшению прогностической способности моделей QSAR и QSPR.

Перераспределение $\rho(r)$ приводит к появлению и локализации нуклеофильных и электрофильных областей в пределах одной молекулы. Определение таких областей возможно на основе сравнения элект-

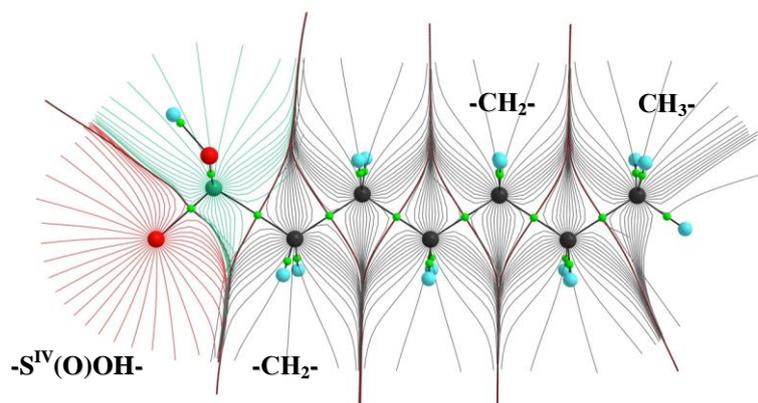
троотрицательностей групп $\chi(R)$, количественной мерой которых может служить изменение заряда, возникающее под влиянием соседних структурных частей. Соотношение между величинами $\chi(R)$ можно получить из анализа $q(R)$ при замещении атомных группировок. Величины парциальных (групповых) зарядов позволяют не только предположить возможный реакционный центр молекулы, но и его ориентацию по отношению к реагенту [7–8].

Любое прогнозируемое экстенсивное свойство молекулы можно представить в виде суммы вкладов парциальных свойств групп [9–11], с учетом соответствующих поправок на индуктивный эффект [12]. Ранее качественное и количественное сравнение электроотрицательностей большого числа заместителей проводилось на основании сопоставления их натуральных зарядов. Разности электроотрицательностей $\Delta\chi$ ряда групп R и R' [т.е. $\Delta\chi = \chi(R) - \chi(R')$], найденные численным дифференцированием полной энергии по числу электронов, приведены в работе [13]; сравнение $\chi(R)$ для углеводородов и их радикалов дано в [14–17; 20–22]. Однако в этих исследованиях не были учтены некоторые важные атомные группировки, содержащие серу и кислород.

Целью данной работы явилось дальнейшее расширение шкалы $\chi(R)$ функциональных групп с включением соединений гомологического ряда сульфоновых кислот $C_nH_{2n+1}-S(O)OH$, где $n \leq 10$. Актуальность выбора изучения данного ряда веществ связана с широкой областью применения сульфоновых кислот и их производных в качестве катализаторов низкотемпературной полимеризации, эмульгаторов, регуляторов роста растений, промежуточных продуктов в синтезе лекарственных препаратов и т.д. Ранее была определена частная шкала $\chi(R)$ с включением некоторых групп, содержащих атомы серы [17; 20–22].

Переносимость энергии групп $E(R)$ между различными молекулами гомологических рядов требует использования поправок, связанных с точным учетом корреляцией движения электронов, так как ρ , полученная при решении уравнений Рутана–Холла в приближении Борна–Оппенгеймера, не совсем корректно описывает силы, действующие на ядра химической структуры [2].

Равновесное строение и распределение электронной плотности (рис. 1) $C_nH_{2n+1}-S^{IV}(O)OH$, где $n \leq 10$, найдено с использованием программы GAUSSIAN 03 [18] методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd).



Р и с . 1. Молекулярный граф и векторное поле градиента электронной плотности $C_6H_{13}-S(O)OH$ гексансульфиновой кислоты с указанием положения критических точек связывающих путей и проходящих через эти точки поверхностей нулевого потока градиента электронной плотности (межатомных поверхностей) для групп CH_3- , $-CH_2-$, $-S^{IV}(O)OH$

В рамках QTAIM [2] q , E , V атомов Ω вычислены численным интегрированием в пределах межатомных поверхностей и изоповерхности электронной плотности 0.001 а.е. с помощью программы AIMALL [19]. Все величины, полученные для Ω , были разнесены по функциональным группам (R). Погрешность расчёта парциальных зарядов $q(R)$, $q(E)$ составила не более 0.001 а.е., для $q(V)$ не более 0,1 а.е. (1 а.е. заряда = $1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл, 1 а.е. энергии = 2625,4999 Кдж/моль, 1 а.е. объёма = 0,08926 см³/моль).

Изученные равновесные структуры 11 нециклических молекул гомологического ряда сульфоновых кислот были представлены в виде различных комбинаций атомных и функциональных групп, и для каждой атомной группировки найдены $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$. На основе полученных данных составлена шкала $\chi(R)$. Для каждой молекулы было проведено сравнение $q(R)$. При этом, чем больше $q(R)$, тем левее группа R располагается на индивидуальной шкале $\chi(R)$.

Таблица 1.

Заряды $q(R)$ групп ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)_n$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекула	Функциональные группы										
	CH_3	$-CH_2-$	$-S(O)_n$								
$CH_3S(O)OH$	0,033										-0,033
$C_2H_5S(O)OH$	0,067	-0,003									-0,063
$C_3H_7S(O)OH$	0,017	0,068									-0,065
$C_4H_9S(O)OH$	0,002	0,032									-0,065
$C_5H_{11}S(O)OH$	-0,005	0,023							0,052		-0,066
$C_6H_{13}S(O)OH$	-0,009	0,020					0,008	0,016	0,051		-0,066
$C_7H_{15}S(O)OH$	-0,010	0,017					0,008	0,016	0,052		-0,067
$C_8H_{17}S(O)OH$	-0,012	0,017				0,005	0,008	0,016	0,052		-0,067
$C_9H_{19}S(O)OH$	-0,013	0,016			0,003	0,002	0,008	0,016	0,051		-0,067
$C_{10}H_{21}S(O)OH$	-0,014	0,016	0,002	0,002	0,003	0,005	0,008	0,016	0,051	-0,020	-0,067

В молекуле этансульфиновой кислоты $C_2H_5-S(O)OH$ (табл. 1) заряды функциональных групп равны: $q(CH_3) = 0.067$ а.е., $q(CH_2) = -0.003$ а.е., и $q(-S^{IV}(O)OH) = -0.063$ а.е. т.е.

$$q(CH_3) > q(CH_2) > q(-S^{IV}(O)OH)$$

и, следовательно, для этого соединения качественная шкала электроотрицательностей есть:

$$\chi(CH_3) < \chi(CH_2) < \chi(-S^{IV}(O)OH).$$

Использование формализма QТАИМ позволяет выделить в молекулах «топологические» группы и атомы. Так, фрагмент $S(O)OH$ разбивается на следующие топологические группы: $(O=)$, $(-S^{IV}-)$, $(-S^{IV}(O)-)$, $(-OH)$ и $(-S^{IV}(OH)=)$ с величинами зарядов: $q(O) = -1.295$ а.е., $q(-S^{IV}-) = 1.783$ а.е., $q(-S^{IV}(O)-) = 0.487$ а.е., $q(-OH) = -0.551$ а.е. и $q(-S^{IV}(OH)=) = 1.232$ а.е. (табл. 2). Сравнение $q(R)$ в $-S(O)OH$ приводит к:

$$q(-S^{IV}-) > q(-S^{IV}(OH)=) > q(-S^{IV}(O)-) > q(-OH) > q(=O)$$

и соответственно шкала $\chi(R)$ для них представлена распределением, которое сохраняется в гомологическом ряду:

$$\chi(-S^{IV}-) < \chi(-S^{IV}(OH)=) < \chi(-S^{IV}(O)-) < \chi(-OH) < \chi(=O).$$

Таблица 2.

Заряды $q(R)$ топологических групп и атомов $S(O)OH$ участка ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)OH$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекула	Топологические группы и атомы в $S(O)OH$				
	-S-	-OH	=O	-S(OH)=	-S(O)-
$CH_3S(O)OH$	1,811	-0,549	-1,295	1,262	0,516
$C_2H_5S(O)OH$	1,783	-0,551	-1,295	1,232	0,487
$C_3H_7S(O)OH$	1,782	-0,551	-1,296	1,231	0,486
$C_4H_9S(O)OH$	1,781	-0,551	-1,296	1,23	0,486
$C_5H_{11}S(O)OH$	1,781	-0,551	-1,296	1,229	0,485
$C_6H_{13}S(O)OH$	1,781	-0,551	-1,296	1,230	0,485
$C_7H_{15}S(O)OH$	1,781	-0,551	-1,296	1,229	0,485
$C_8H_{17}S(O)OH$	1,781	-0,552	-1,296	1,229	0,485
$C_9H_{19}S(O)OH$	1,781	-0,552	-1,296	1,229	0,485
$C_{10}H_{21}S(O)OH$	1,781	-0,552	-1,296	1,229	0,485

Сопоставление индивидуальных шкал χ для каждой молекулы гомологического ряда $C_nH_{2n+1}-S(O)OH$ выявило «уникальность» χ у «возбужденных» групп $-CH_2-$, находящихся в α положении относительно участка $-S(O)OH$ (в дальнейшем обозначается верхним индексом α $(CH_2)^\alpha$). Отрицательная величина заряда на $(CH_2)^\alpha$ в молекулах вызвана «перетеканием» $\rho(r)$ от соседнего атома $-S^{IV}-$ и увеличением $\rho(r)$ в области кратной связи группировки $-S(O)OH$ (рис. 1). При сравнении с данными [20–22] отмечена обратная зависимость заряда $(CH_2)^\alpha$ (рис. 2) от заряда концевых участков молекул - X: чем меньше $q(X)$ в исследованных молекулах, тем больше значение $q(CH_2)^\alpha$.

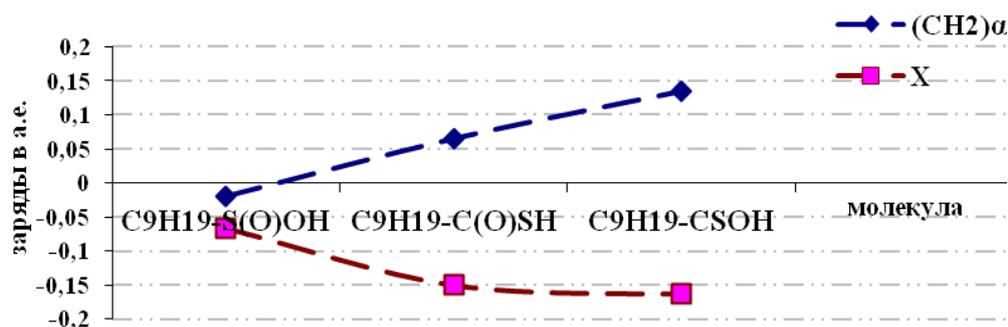


Рис. 2: Зависимость заряда $(CH_2)^\alpha$ от заместителя X в молекулах $C_nH_{2n+1}-X$, где $n \leq 10$, а $X = -S^{IV}(O)OH$, $-C \equiv S^{IV}-OH$ и $-C(O)S^{II}H$

В молекуле $C_2H_5-S(O)OH$ группа $(CH_2)^\alpha$ обладает большим отрицательным зарядом в сравнении с CH_3 (табл. 1) и:

$$\chi(CH_3) < \chi(CH_2)$$

Однако с ростом углеводородной цепи и удалении CH_3 от возмущающего центра $S(O)OH$ участка следует, что $q(CH_3) < q(CH_2)$ и

$$\chi(CH_2) < \chi(CH_3).$$

В этом случае общая шкала $\chi(R)$ гомологического ряда сульфиновых кислот

$$\chi(CH_2) < \chi(CH_3) < \chi(-S^{IV}(O)OH).$$

Объединение $\chi(R)$ ряда сульфиновых кислот с качественной шкалой электроотрицательностей топологических групп и атомов участка $S(O)OH$ приводит к

$$\chi(-S^{IV}-) < \chi(-S^{IV}(OH)=) < \chi(-S^{IV}(O)-) < \chi(CH_2) < \chi(CH_3) < \chi(-S^{IV}(O)OH) < \chi(-OH) < \chi(=O).$$

Таким образом, во всех изученных молекулах $C_nH_{2n+1}-S(O)OH$, $n \leq 10$, группы $-S^{IV}(O)OH$, $-OH$, и $=O$ всегда проявляют электроноакцепторные свойства. Нуклеофильным участком цепи является $-S^{IV}-$, а электрофильные свойства характерны для $-S^{IV}(O)OH$, $(CH_2)^\alpha$, $-OH$ и для $=O$. Индуктивный эффект от $S^{IV}(O)OH$ распространяется на четыре $-CH_2-$ группы, тогда как от CH_3 на одну $-CH_2-$, что следует из изменения зарядов, энергий и объемов этих групп (табл. 1 – 6).

Таблица 3.

Полная энергия атомных групп $-E(R)$ ряда $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_n-\text{S}(\text{O})\text{OH}$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекулы	Функциональные группы									
	CH_3	$-\text{CH}_2-$	$-\text{S}(\text{O})\text{OH}$							
$\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,808									549,438
$\text{C}_2\text{H}_5\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,774	39,224								549,577
$\text{C}_3\text{H}_7\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,799	39,176							39,248	549,679
$\text{C}_4\text{H}_9\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,811	39,195						39,200	39,254	549,770
$\text{C}_5\text{H}_{11}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,819	39,205					39,217	39,205	39,260	549,852
$\text{C}_6\text{H}_{13}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,826	39,211						39,227	39,222	549,926
$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,831	39,217					39,232	39,231	39,226	549,993
$\text{C}_8\text{H}_{17}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,836	39,221					39,237	39,236	39,231	550,053
$\text{C}_9\text{H}_{19}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,840	39,225					39,240	39,239	39,235	550,109
$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{S}(\text{O})\text{OH}$	39,844	39,229					39,244	39,243	39,238	550,160
							39,245	39,244	39,238	

Энергия невозмущённых групп $E(-\text{CH}_2-)$ (табл. 3, 4) больше, чем у $-\text{CH}_2-$, подверженных индуктивному влиянию обоих концевых участков молекулы. Так $E(\text{CH}_2)^\alpha$ на 0.038 а.е. меньше, чем E «стандартных» групп и на 0.053 а.е. больше $E(-\text{CH}_2-)$, подверженной влиянию CH_3 . Такая разница в энергиях появляется, начиная с $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{S}(\text{O})\text{OH}$ и сохраняется с удлинением цепи (рис. 1). Изменение объёма этих групп внутри изоповерхности 0.001 а.е. (табл. 5, 6) отличается от изменения у них энергии. У невозмущённых $V(-\text{CH}_2-) = 158.7$ а.е., что на 3.8 а.е. больше, чем $V(\text{CH}_2)^\alpha = 154.9$ а.е. и на 0.9 а.е. меньше, чем $V(-\text{CH}_2-)$, находящейся под индуктивным влиянием CH_3 .

Таблица 4.

Полная энергия $-E(R)$ топологических групп и атомов $S(O)OH$ участка ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)OH$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекулы	Топологические группы и атомы в $S(O)OH$				
	-S-	-OH	=O	-S(OH)=	-S(O)-
$CH_3S(O)OH$	397,569	76,044	75,824	473,614	473,393
$C_2H_5S(O)OH$	397,679	76,061	75,837	473,740	473,516
$C_3H_7S(O)OH$	397,752	76,075	75,815	473,828	473,604
$C_4H_9S(O)OH$	397,819	76,088	75,864	473,906	473,682
$C_5H_{11}S(O)OH$	397,878	76,099	75,875	473,977	473,753
$C_6H_{13}S(O)OH$	397,932	76,109	75,885	474,041	473,817
$C_7H_{15}S(O)OH$	397,980	76,119	75,894	474,098	473,874
$C_8H_{17}S(O)OH$	398,024	76,127	75,903	474,151	473,926
$C_9H_{19}S(O)OH$	398,064	76,135	75,910	474,198	473,974
$C_{10}H_{21}S(O)OH$	398,100	76,142	75,917	474,242	474,018

Сравнение зарядов, энергий и объёмов групп (табл. 1–6) позволило (с учетом расчётной погрешности) выделить переносимые группы (табл. 7) и определить, что дальность распространения индуктивного эффекта от $S(O)OH$ - четыре группы $-CH_2-$

Таблица 5.

Объём $V(R)$ топологических групп и атомов $S(O)OH$ участка ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)OH$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекулы	Топологические группы и атомы в $S(O)OH$				
	-S-	-OH	=O	-S(OH)=	-S(O)-
$CH_3S(O)OH$	112,0	147,4	141,4	259,4	253,5
$C_2H_5S(O)OH$	112,1	146,1	141,4	258,1	253,4
$C_3H_7S(O)OH$	112,0	146,1	141,4	258,2	253,4
$C_4H_9S(O)OH$	112,0	146,1	141,4	258,1	253,4
$C_5H_{11}S(O)OH$	112,2	146,0	141,4	258,2	253,6
$C_6H_{13}S(O)OH$	112,1	146,0	141,4	258,2	253,6
$C_7H_{15}S(O)OH$	112,1	146,0	141,4	258,1	253,5
$C_8H_{17}S(O)OH$	112,1	146,2	141,4	258,2	253,4
$C_9H_{19}S(O)OH$	112,1	146,1	141,4	258,2	253,5
$C_{10}H_{21}S(O)OH$	112,1	146,2	141,4	258,2	253,4

В рамках QTAIM на основании вычисленных зарядов проведено сравнение электроотрицательностей атомных групп $\chi(R)$ в молекулах $C_nH_{2n+1}S^{IV}(O)OH$, где $n \leq 10$, и построена качественная шкала $\chi(R)$. Во всех изученных структурах максимальной электрооакцепторностью обладают группы $-S(O)OH$, $=O$ и OH .

Таблица 6.
Объём атомных групп $I(R)$ ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)_nOH$, где $n \leq 9$, в а.е.

Молекулы	Функциональные группы									
	CH_3	$-CH_2-$	$-S(O)OH$							
$CH_3S(O)OH$	216,1									400,8
$C_2H_5S(O)OH$	217,5	155,9								399,5
$C_3H_7S(O)OH$	221,6	155,7							155,0	399,5
$C_4H_9S(O)OH$	222,4	159,1						154,8	155,0	399,5
$C_5H_{11}S(O)OH$	222,8	159,2					158,0	154,7	155,2	399,6
$C_6H_{13}S(O)OH$	223,1	159,4				158,3	158,0	154,7	154,9	399,6
$C_7H_{15}S(O)OH$	223,2	159,6			158,5	158,2	157,9	154,7	154,9	399,5
$C_8H_{17}S(O)OH$	223,6	159,8		158,9	158,7	158,4	158,2	154,8	154,9	399,6
$C_9H_{19}S(O)OH$	223,7	159,8		158,9	158,7	158,5	158,4	158,2	155,0	399,6
$C_{10}H_{21}S(O)OH$	223,7	159,8	158,9	158,7	158,7	158,6	158,3	158,1	154,9	399,6

Таблица 7.
Параметры переносимых групп ряда $CH_3-(CH_2)_n-S(O)_nOH$, где $n \leq 9$, в а.е.

Параметры переносимости	Функциональные и топологические атомы и группы									
	CH_3	$-CH_2-$	$-S-$	$-OH$	$=O$	$-S(OH)=$	$-S(O)-$	$-S(O)OH$		
$q(R)$	-0,014	0,002	1,781	-0,552	-1,296	1,229	0,485	-0,067		
$-E(R)$	39,844	39,244	398,100	76,142	75,917	474,242	474,018	550,160		
$I(R)$	223,7	158,8	112,1	146,2	141,4	258,2	253,4	399,6		



Список литературы

1. Baskin I.I., Keshtova S.V., Palyulin V.A., Zefirov N.S. Combining Molecular Modelling with the Use of Artificial Neural Networks as an Approach to Predict Substituent Constants and Bioactivity. In *Molecular Modeling and Prediction of Bioactivity*// K. Gundertofte; F.S. Jorgensen, Eds.; Klummer Academic/Plenum Publishers: New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow; 1999. P. 468–469.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 532 с.
3. Паулинг Л. (Полинг) Природа химической связи, М., Л., Госхимиздат, 1947, 440 с.
4. Черкасов А.Р., Галкин В.И., Зуева Е.М., Черкасов Р.А. // *Успехи химии*. 1998. Т. 67. № 5, С. 423 – 441.
5. Урусов В.С. // *ЖСХ*. 1994. Т. 35. № 1, С. 111 – 127.
6. Сироткин О.С., Трубачева А.М., Иванова С.Н. Циклы. // *Материалы VII Междунар. конф.* 25.05. 05-27.05.2005. Ставрополь: СевКавГТУ, 2005. Т. 2. С. 54–59.
7. Панкратов А.Н., Щавелев А.Е // *ЖСХ*. 1999. Т. 40. № 6, С. 1059 –1066.
8. Pankratov A.N. Electronic structure and reactivity of inorganic, organic, organoelement and coordination compounds: an experience in the area of applied quantum chemistry. Nova Science Publishers, Inc., New York. 2007. P. 82–89.
9. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Мир. 1971. 306 с.
10. Татевский В.М. Квантовая механика и теория строения молекул. М.: МГУ, 1965. 164 с.
11. Флайгер У. Структура и динамика молекулы. Т. 1, 2. М.: Мир, 1982.
12. Верещагин А.Н. Индуктивный эффект. М.: Наука. 1987. 326 с.
13. Cioslowski J., Mixon S.T. // *J. Am. Chem. Soc.* 1993. V. 115. № 3, P. 1084–1088.
14. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А. // *ЖФХ*. 2009. Т. 83. № 2, С. 313–321.
15. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *ЖФХ*. 2010. Т. 84. № 6, С. 1074–1080.
16. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *ЖФХ*. 2010. Т. 84. № 7, С. 1296–1303.
17. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *ЖПХ*. 2011. Т. 84 № 9, С. 1578–1580.
18. Gaussian 03. Revision E.01. /M.J.Frisch et.al. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
19. AIMAll (Version 11.09.18, Professional), Todd A. Keith, 2010. URL: <http://aim.tkgristmill.com>
20. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *Вестн. Твер. гос. ун-та. Сер. «Химия»*. 2010. № 10. С. 4–8
21. Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В., Чернова Е.М. // *Химия биологически активных веществ «ХимБиоАктив–2012»*. Всерос. конф. молодых учёных, аспирантов и студентов с междунар. участием, 25–27 сент. 2012. Межвуз. сб. науч. трудов Саратов: КУБиК, 2012. С. 193–194.
22. Русакова Н.П., Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *Современные проблемы теоретической и экспериментальной химии: VII Всерос.*

конф. молодых ученых с международным участием, июнь 2010: Межвуз. сб. науч. тр. Саратов: 2010. С. 326–328.

COMPARATIVE ANALYSIS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND ATOMIC GROUP ELECTRONEGATIVITIES OF SULFINIC ACIDS

N.P. Rusakova¹, V.V. Turovtsev², Yu.D. Orlov¹

¹Tver State University, Tver

² Tver State Medical Academy, Tver

This article analyzes the intramolecular interactions in heteronuclear organic compounds containing S^{IV} and O, in order to improve predictive ability of QSAR and QSPR. The quality ratios were obtained within the "quantum theory of atoms in molecules", and the madeuo a series for the electronegativities of functional groups of sulfinic acids was C_nH_{2n+2}SO₂, where n ≤ 10.

Keywords: QSAR and QSPR, intramolecular interactions, functional groups, electronegativity, quantum theory of atoms in molecules, QTAIM.

Об авторах:

РУСАКОВА Наталья Петровна – ведущий инженер кафедры общей физики тверского государственного университета, e-mail: d002186@tversu.ru

ТУРОВЦЕВ Владимир Владимирович, заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики, доцент кафедры физики, математики и медицинской информатики Тверской государственной медицинской академии, доцент кафедры общей физики Тверского государственного университета. e-mail: turtsma@tversu.ru

ОРЛОВ Юрий Дмитриевич – доктор химических наук, профессор, проректор по информатизации, заведующий кафедрой общей физики Тверского государственного университета, e-mail: IT@tversu.ru.