

УДК: 544.163.2: 544.122.3  
DOI 10.26456/vtchem2022.1.6

## ЗАРЯДЫ И ОБЪЕМЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП АМИНОКИСЛОТ И АМИНОАЛЬДЕГИДОВ

Я.А. Матус, Н.П. Русакова, В.А. Завилейская, Ю.Д. Орлов

Тверской государственной университет, г. Тверь

С использованием «квантовой теории атомов в молекулах» (QТАИМ) определены интегральные электронные характеристики (заряды и объемы) функциональных групп  $\text{NH}_2$ ,  $\text{C}(\text{O})\text{H}$ ,  $\text{SH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ,  $\text{CH}_2\text{COOH}$ ,  $\text{COOH}$ ,  $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-OH}$  и  $\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$  десяти молекул  $\alpha$ -аминокислот и такого же количества  $\alpha$ -аминоальдегидов. Показано, что преобразование структуры (замена  $\text{COOH}$  на  $\text{C}(\text{O})\text{H}$ ) снижает заряд заместителя и аминогруппы, увеличивает объем атомного бассейна  $\text{NH}_2$ . Рассмотрена электроотрицательность групп, установлено стерическое влияние объема фрагмента  $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-OH}$  на  $\text{NH}_2$ . Составлена качественная шкала электроотрицательностей функциональных групп ( $\chi(R)$ ) исследуемых соединений и описан алгоритм шкалирования  $\chi(R)$ .

**Ключевые слова:** электронная плотность, стерический эффект, электроотрицательность, «квантовая теория атомов в молекулах».

Роль аминокислот (АМК) и альдегидов огромна, многообразие выполняемых ими функций неисчислимо, а значение для человека трудно переоценить. АМК являются основными компонентами биосинтеза белков и ферментов всех живых организмов [1]. Эти важнейшие вещества используются в медицине и фармакологии [2], в пищевой отрасли [3] и в химическом производстве [4] и т.д. К примеру, цистеин является материалом для синтеза лекарственных препаратов, назначаемых при хронических болезнях легких, серин способствует нормальному функционированию иммунной системы, распад пищевого синтетического сахарозаменителя восполняет в организме человека недостаток фенилаланина [5–7]. Метаболиты тирозина преобразуются в нейротрансмиттеры адреналин и норадреналин, недостаток которых приводит к развитию болезни Паркинсона и шизофрении [8].

Физические и химические свойства белков определяются его аминокислотным составом. Каждая из аминокислот, за исключением глицина, может существовать в виде двух оптических форм – стереоизомеров, которые являются взаимными зеркальными отображениями. Различают *D*- и *L*- изомеры по оптической активности – они вращают плоскость поляризованного света на один и тот же угол, но в различных направлениях. Все АМК живых организмов являются *L*-

формами, за исключением нескольких небольших белков (пептидов), которые встречаются в бактериях [9]. Поэтому стереоселективный синтез АМК является важнейшей областью химии [10–17].

Альдегиды – это универсальные соединения, которые применяются в производстве смол, красителей и органических кислот, а также духов для одеколона, моющих средств и мыла [18]. Присутствие  $\alpha$ -аминоальдегидов в лекарственных препаратах, в промежуточных продуктах синтеза гетероциклов делает эти аминокarbонильные соединения одними из важнейших веществ, обладающих стереоспецифичностью [19]. Аминоальдегиды, полученные из глицина, аланина, валина, лейцина, фенилаланина, изолейцина, серина, триптофана, метионина и цистеина эффективно используются в качестве субстратов реакции гидроацилирования [20]. Наличие в структуре молекул полярной карбонильной группы  $C=O$  приводит к образованию димеров, хорошей растворимости этих веществ и более высоким температурам плавления и кипения по отношению к соответствующим предельным углеводородам [21–22].

Исследование свойств соединений, в том числе АМК и альдегидов проводится как экспериментально, так и методами теоретической химии. Среди теоретических подходов хорошо зарекомендовали себя метод функционала плотности [23–25] и «квантовая теория атомов в молекулах» Р.Бейдера (QTAIM) [26], как наиболее гармонично сочетающие в себе скорость вычислений с получаемой точностью результата. Рассчитанные с помощью QTAIM интегральные характеристики электронной плотности заряды  $q(R)$  и объемы  $V(R)$  можно использовать в феноменологических моделях и в качестве дескрипторов молекулярной структуры количественных корреляций QSPR, QSAR [27–28]. Соотношение зарядов дает возможность сравнить электроотрицательность групп ( $\chi(R)$ ) [29] и оценить индуктивный эффект ( $\pm I$ -эффект) функциональных групп [30]. Изменение  $V(R)$  одной группы в разных молекулах, отличающихся заместителем, позволяет описать сферический эффект ( $S$ -эффект). Сравнение  $q(R)$ ,  $V(R)$  и  $\chi(R)$  аминоальдегидов и аминокислот позволит лучше понять переносимость функциональных групп в  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегидах.

### **Объекты и методы квантово-химических вычислений**

Описанию свойств аминокислот посвящено множество материалов, в том числе публикации [31–32], и данная работа в этой области носит уточняющий характер – рассматриваются интегральные характеристики групп (заряды  $q(R)$  и объемы  $V(R)$ ). Структурное преобразование оптимизированных  $\alpha$ -АМК (замена карбоксильной группы на карбонильную) позволяет найти равновесную геометрию и соответствующее ей распределение электронной плотности  $\alpha$ -аминоальдегидов, рассчитать для них  $q(R)$  и  $V(R)$ . Сравнение

интегральных параметров групп с аналогичными в  $\alpha$ -АМК дает возможность оценить влияние  $C(O)OH$  и  $C(O)H$  на электронные свойства остальной структуры.

Вычисление  $q(R)$  и  $V(R)$  функциональных групп проведено для десяти  $\alpha$ -АМК (цистеин – 1, серин – 2, фенилаланин – 3, тирозин – 4, глутаминовая кислота – 5, глутамин – 6, метионин – 7, треонин – 8, аспарагиновая кислота – 9 и аспарагин – 10) и соответствующих им  $\alpha$ -аминоальдегидов (2-амино-3-меркаптопропаналь – 1'; 2-амино-3-гидроксипропаналь – 2'; 2-амино-3-фенилпропаналь – 3'; 2-амино-3-пара-гидроксифенилпропаналь – 4'; 2-амино-4-карбобутаналь – 5'; 2,5-диамино-5-оксопентаналь – 6'; 2-амино-4-метилтиобутаналь – 7'; 2-амино-3-гидроксипропаналь – 8'; 2-амино-3-карбопропаналь – 9'; 2,4-диамино-4-оксобутаналь – 10'). Рассматриваемые  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегиды обладают общей структурной формулой  $H_2N-C(C(O)OH)H-CH_2-R$  и  $H_2N-C(C(O)H)H-CH_2-R$  (Рис. 1), где  $R = SH$  (1, 1'),  $OH$  (2, 2'),  $C_6H_5$  (3, 3'),  $C_6H_4-OH$  (4, 4'),  $CH_2-C(O)OH$  (5, 5'),  $CH_2-C(O)-NH_2$  (6, 6'),  $C_2H_5S$  (7, 7'),  $C(O)OH$  (9, 9') и  $C(O)-NH_2$  (10, 10'), за исключением треонина (8) и 2-амино-3-гидроксипропанола (8'), чья структура отличается от представленной на Рис. 1. После аминокислотного (аминоальдегидного) фрагмента молекул 8 и 8' в положении группы  $CH_2$  находится третзамещенный (хиральный) атом углерода (группа  $CH$ ), поэтому в материалах статьи используется форма:  $H_2N-C(C(O)OH)H-CH(CH_3)-OH$  (8) и  $H_2N-C(C(O)H)H-CH(CH_3)-OH$  (8'), или  $H_2N-C(C(O)OH)H-R$  и  $H_2N-C(C(O)H)H-R$ , где  $R = -CH(CH_3)-OH$ . Сходство общей формулы исследуемых соединений, наличие метиленов в структуре молекул предполагает сходство интегральных электронных характеристик одинаковых  $R$ .

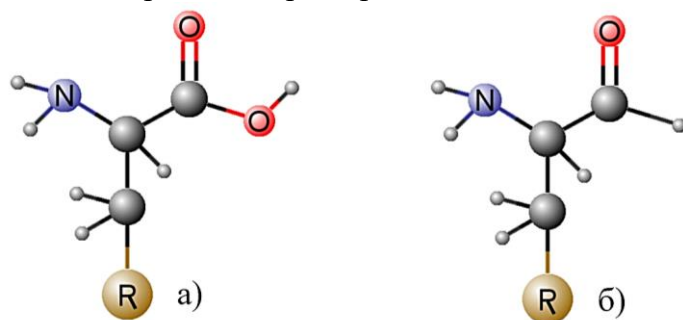


Рис. 1. Общая формула для: а)  $\alpha$ -аминокислот и б)  $\alpha$ -аминоальдегидов

Оптимизация геометрии рассматриваемых соединений проведена с использованием метода функционала плотности B3LYP в пакете программ GAUSSIAN 03 [33]. Включение в расчетный базис 6311++g(3df,3pd) диффузных функций на тяжелые и легкие атомы позволило описать электронную плотность при большем удалении от ядер и показать наличие слабых внутримолекулярных взаимодействий.

Поиск энергетических минимумов *L*-стереоизомеров исследуемых соединений осуществлен в газовой фазе для моделей с отсутствием внутримолекулярных водородных связей N...H между азотом аминогруппы и водородом карбоксильной. Подбор таких состояний позволил исключить в атомных бассейнах N и H перераспределение электронной плотности, вызываемое взаимодействием N...H и влияющее на электронные характеристики атомов.

Заряды  $q$  и объемы  $V$  атомов были получены в рамках QTAIM численным интегрированием в пределах межатомных поверхностей и изоповерхности электронной плотности 0,001 а.е. с помощью программы AIMALL [34]. Параметры функциональных групп  $q(R)$  и  $V(R)$  были суммированы из интегральных характеристик соответствующих атомов и сведены в Таблицу 1, где  $\alpha$ -АМК пронумерованы арабскими цифрами, соответствующие им  $\alpha$ -аминоальдегиды соответствующей цифрой с апострофом (верхним штрихом). Для удобства представления данных заместитель -CH(CH<sub>3</sub>)-OH разбит на группы CH, CH<sub>3</sub> и OH – это отражено в значениях строк соединений 8 и 8' Таблицы, помеченных \* и \*\*\*, тогда как \*\* отмечены данные второй CH<sub>2</sub> молекул 5 и 5', 6 и 6'. Погрешность расчета парциальных зарядов  $q(R)$  составила не более 0,001 а.е., а для  $V(R)$  составила не более 0,01 Å<sup>3</sup>. Данная методика хорошо зарекомендовала себя в исследованиях [35-38].

Основная рабочая гипотеза предполагает наличие у идентичных групп ( $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегидов) сходных электронных параметров заряда и объема. Построение еще двух предположений основано на данных из [39, 40], полученных с помощью вышеописанной методики для гомологических рядов *n*-карбоновых кислот и *n*-альдегидов: для C(O)H стандартный  $V(R)$  на 10,68 Å<sup>3</sup> меньше, а  $q(R)$  на 0,063 а.е. выше, чем аналогичные характеристики у C(O)OH. Первое – электроотрицательность C(O)H меньше, чем  $\chi$ (C(O)OH), следовательно, доля электронной плотности стягиваемая с соседней CH тоже уменьшится и это отразится в понижении  $q$ (CH),  $q$ (CH<sub>2</sub>) и  $q$ (NH<sub>2</sub>) в  $\alpha$ -аминоальдегидах (по сравнению с индуктивным влиянием C(O)OH в исходных  $\alpha$ -АМК); второе – стерический эффект C(O)H слабее, чем C(O)OH, поэтому  $V$ (CH) у  $\alpha$ -аминоальдегидов будет выше, чем  $V$ (CH) аналогичных  $\alpha$ -АМК.

### Результаты и их обсуждение

Структурное преобразование  $\alpha$ -АМК карбонильной группой (место C(O)OH занимает C(O)H) сопровождается изменением свойств соединений, в том числе электронных – зарядов и объемов групп ( $R$ ), составляющих молекулу (табл. 1).

Таблица 1

Заряды  $q(R)$  и объемы  $V(R)$  групп  $\alpha$ -аминокислот (I) и  $\alpha$ -аминоальдегидов (II)

I	NH <sub>2</sub>	CH	COOH	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub>	R	R
<i>q(R), в а.е.</i>							
1	-0,290	0,436	-0,177	0,051		-0,019	SH
2	-0,297	0,438	-0,160	0,564		-0,545	OH
3	-0,300	0,421	-0,179	0,084		-0,026	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>
4	-0,301	0,420	-0,182	0,084		-0,021	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> OH
5	-0,296	0,418	-0,185	0,111	0,103**	-0,151	C(O)OH
6	-0,298	0,414	-0,188	0,112	0,040**	-0,079	C(O)NH <sub>2</sub>
7	-0,297	0,420	-0,185	0,091		-0,029	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S
8	-0,299	0,365	-0,135	0,535*	0,081***	-0,547	OH
9	-0,291	0,447	-0,160	0,147		-0,144	C(O)OH
10	-0,297	0,458	-0,171	0,080		-0,071	C(O)NH <sub>2</sub>
<i>V(R), в Å<sup>3</sup></i>							
1	26,92	13,25	46,56	22,58		38,66	SH
2	26,82	13,24	46,64	21,73		21,79	OH
3	26,87	13,38	46,84	22,41		108,57	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>
4	26,90	13,38	46,85	22,44		118,79	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> OH
5	26,69	13,38	46,67	22,11	22,51**	46,89	C(O)OH
6	26,66	13,45	46,63	22,10	22,80**	52,67	C(O)NH <sub>2</sub>
7	26,71	13,37	46,72	22,53		85,36	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S
8	26,29	13,79	45,75	13,34*	31,26***	21,49	OH
9	26,91	12,92	46,47	22,09		46,59	C(O)OH
10	26,98	12,76	46,62	22,47		52,38	C(O)NH <sub>2</sub>
II	NH <sub>2</sub>	CH	COH	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub>	R	R
<i>q(R), в а.е.</i>							
1'	-0,298	0,382	-0,069	0,029		-0,044	SH
2'	-0,307	0,389	-0,073	0,542		-0,551	OH
3'	-0,311	0,368	-0,088	0,069		-0,039	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>
4'	-0,312	0,366	-0,090	0,069		-0,032	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> OH
5'	-0,301	0,375	-0,120	0,098	0,093**	-0,144	C(O)OH
6'	-0,306	0,363	-0,100	0,100	0,017**	-0,074	C(O)NH <sub>2</sub>
7'	-0,305	0,362	-0,092	0,078		-0,043	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S
8'	-0,288	0,382	-0,102	0,516*	0,040***	-0,547	OH
9'	-0,302	0,402	-0,069	0,128		-0,159	COOH
10'	-0,308	0,413	-0,081	0,061		-0,086	C(O)NH <sub>2</sub>
<i>V(R), в Å<sup>3</sup></i>							
1'	26,47	13,93	34,98	23,06		38,92	SH
2'	26,60	13,86	34,96	22,07		21,72	OH
3'	26,62	14,00	35,13	22,78		108,40	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>
4'	26,63	14,02	35,16	22,81		118,64	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> OH
5'	26,63	13,87	35,68	22,22	22,64**	46,82	C(O)OH
6'	26,59	14,07	35,27	22,27	23,09**	52,59	C(O)NH <sub>2</sub>
7'	26,58	14,09	35,13	22,74		85,45	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S
8'	25,97	13,66	35,72	13,47*	32,05***	21,32	OH
9'	26,54	13,51	34,81	22,51		46,58	C(O)OH
10'	26,63	13,31	35,02	22,92		52,40	C(O)NH <sub>2</sub>

\* – в 8 и 8' представлены  $q(R)$  и  $V(R)$  группы CH, находящейся в положении группы CH<sub>2</sub> других АМК и альдегидов; \*\*заряд и объем группы CH<sub>2</sub>; \*\*\* заряд и объем группы CH<sub>3</sub>.

Отличие  $q(R)$  идентичных  $R$   $\alpha$ -аминоальдегидов, соответствующих исходным  $\alpha$ -АМК, следующие:  $q(\text{CH})$  снижен (обратный эффект  $q(\text{CH})$  выявлен у 8'),  $q(\text{CH}_2)$  – уменьшен,  $q(\text{NH}_2)$  – понижен (за исключением 8', в котором  $q(\text{NH}_2)$  повышен). Параметр  $q(R)$  соответствующего заместителя в  $\alpha$ -аминоальдегидах 1' – 5', 7', 9' и 10' несколько ниже, чем в  $\alpha$ -АМК (Рис. 2). В соединении 6' величина  $q(\text{C}(\text{O})\text{NH}_2)$  незначительно выше (на 0,005 а.е.), чем в 6, тогда как в 8' изменения заряда заместителя по отношению к 8 нет. Максимальное отличие  $q(R)$  заместителя получено для 1 и 1', оно составляет 0,025 а.е., в остальных случаях оно значительно меньше.

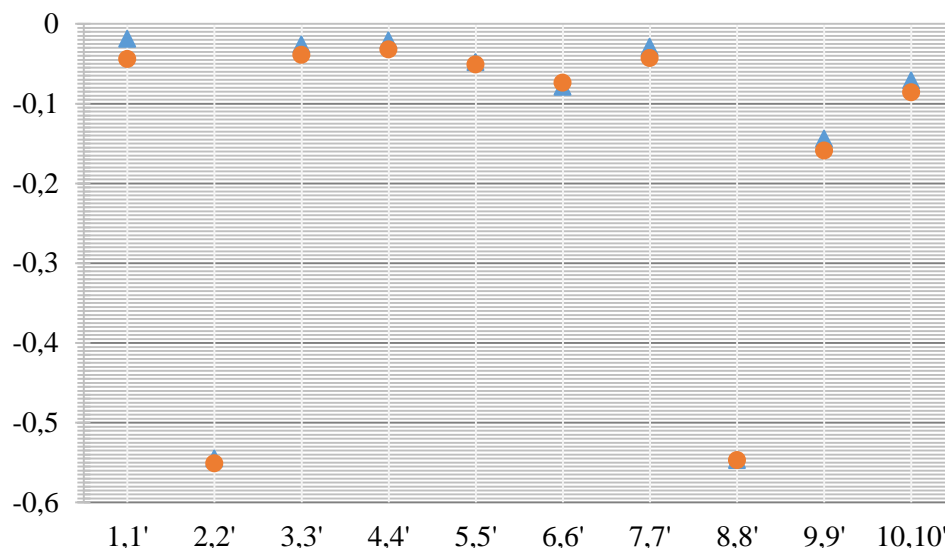


Рис. 2. Заряд заместителей  $q(R)$  в  $\alpha$ -АМК – ▲ и  $\alpha$ -аминоальдегидах – ●

Увеличение  $q(\text{CH})$  и уменьшение  $q(\text{NH}_2)$  в 8' по сравнению с 8 связано с разветвленной структурой заместителя  $-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$ . Наличие в углеводородной цепи молекул 6 и 6' второй  $\text{CH}_2$  сопровождается незначительным изменением  $q(\text{C}(\text{O})\text{NH}_2)$ . Высокая электроотрицательность заместителя  $\chi(\text{OH})$  сопровождается малой подвижностью электронной плотности атомного бассейна  $\text{OH}$  и стабилизацией  $q(\text{OH})$  в 2, 2', 8 и 8'. В остальном сохраняется сходство изменений  $q(R)$  идентичных  $R$   $\alpha$ -аминоальдегидов и соответствующих  $\alpha$ -АМК.

Преобразованию  $\alpha$ -АМК в  $\alpha$ -аминоальдегиды сопутствует увеличение объема групп  $V(\text{CH})$ ,  $V(\text{CH}_2)$  и уменьшение  $V(R)$  аминогруппы (Таблица 1, Рис. 3). Так незначительное снижение  $V(\text{NH}_2)$  получено для 5 и 5', 6 и 6', – оно составило  $0,06 \text{ \AA}^3$ , тогда как в 1' параметр  $V(\text{NH}_2)$  уменьшился на  $0,45 \text{ \AA}^3$  по сравнению с 1. Соединения 8 и 8' обладают меньшими  $V(\text{NH}_2)$  среди рассмотренных молекул, что

связано с формой атомного бассейна заместителя  $-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$  и его стерическим влиянием на  $V(\text{NH}_2)$ .

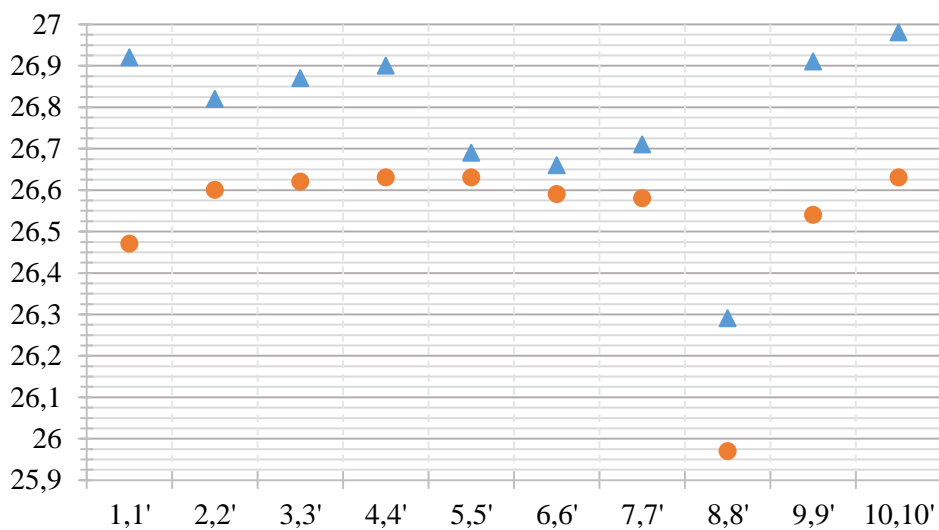


Рис. 3. Объем группы  $\text{NH}_2$  в  $\alpha$ -АМК – ▲ и  $\alpha$ -аминоальдегидах – ●

Замена  $\text{C}(\text{O})\text{OH}$  на  $\text{C}(\text{O})\text{H}$  не влияет на объемы заместителей структур 9 и 9', 10 и 10' (Таблица 1), незначительно понижает  $V(\text{OH})$  в 2' и  $V(\text{C}(\text{O})\text{NH}_2)$  в 6' (на  $0,07 \text{ \AA}^3$ ), немного повышает  $V(\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})\text{OH})$  в 5' (на  $0,06 \text{ \AA}^3$ ) по сравнению с 2, 6 и 5 соответственно. Значительно произошло увеличение  $V(\text{SH})$  в 1', оно составило  $0,26 \text{ \AA}^3$ , уменьшение  $V(\text{C}_6\text{H}_5)$  в 3' и  $V(\text{OH})$  в 8' происходит на  $0,17 \text{ \AA}^3$ , снижение  $V(\text{C}_6\text{H}_4\text{OH})$  в 4' – на  $0,15 \text{ \AA}^3$ , повышение  $V(\text{C}_2\text{H}_5\text{S})$  в 7' – на  $0,11 \text{ \AA}^3$ . Таким образом, при замене в структуре  $\alpha$ -АМК карбоксильной группы на карбонильную, какой-либо тенденции в направлении изменения объема заместителя не найдено. Диапазон увеличения или уменьшения  $V(\text{R})$  идентичных заместителей меньше, чем для  $V(\text{CH})$ ,  $V(\text{CH}_2)$  и  $V(\text{NH}_2)$ .

Построение общей шкалы электроотрицательностей групп, составляющих молекулы рассматриваемых  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегидов, проводилось в три этапа. На первом были получены неравенства  $\chi(\text{R})$  по каждой молекуле. Для этого  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегиды были представлены в виде двух топологических фрагментов  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}-\text{CH}_2-\text{R}$ , где  $\text{R} = \text{SH}$  (1, 1'),  $\text{OH}$  (2, 2'),  $\text{C}_6\text{H}_5$  (3, 3'),  $\text{C}_6\text{H}_4-\text{OH}$  (4, 4'),  $\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})\text{OH}$  (5, 5'),  $\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$  (6, 6'),  $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$  (7, 7'),  $\text{C}(\text{O})\text{OH}$  (9, 9'),  $\text{C}(\text{O})-\text{NH}_2$  (10, 10');  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}-\text{R}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}-\text{R}$ , где  $\text{R} = -\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$  (8, 8') и получены соотношения их зарядов (Таблица 1):

$$q(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}-\text{CH}_2) > q(\text{R}), \text{ (для } 1 - 7 \text{ и } 9, 10);$$

$$q(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}-\text{CH}_2) > q(\text{R}), \text{ (для } 1' - 7', \text{ и } 9', 10');$$

$$q(\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}) > q(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}), \text{ (для } 8);$$

$$q(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{--OH}) > q(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}), \text{ (для } 8');$$

из которых получены неравенства  $\chi(R)$ :

$$\begin{aligned} \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H--CH}_2) &< \chi(R), \text{ (для } 1 - 7 \text{ и } 9, 10); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H--CH}_2) &< \chi(R), \text{ (для } 1' - 7', \text{ и } 9', 10'); \\ \chi(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{--OH}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}), \text{ (для } 8); \\ \chi(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{--OH}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}), \text{ (для } 8') \end{aligned} \quad (1)$$

Кроме этого, в фрагменте  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H--CH}_2$  молекул 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9 и 10 можно выделить аминокислотную часть  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$ , соответствующую 8, а в участке  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H--CH}_2$  соединений 1', 2', 3', 4', 5', 6', 7', 9', и 10' – аминоальдегидную  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$ , аналогичную в 8'. Метилен в 1 – 7, 9, 10, 1' – 7', 9', и 10' – это группа с положительной величиной  $q(\text{CH}_2)$ , на которой сходится влияние двух разных концевых фрагментов (пятый столбец Таблицы). В случае  $\alpha$ -АМК и 3' – 7' оба концевых участка структуры с отрицательной величиной  $q(R)$ , что является следствием оттока электронной плотности в сторону этих  $R$  с  $\text{CH}_2$ . Сравнение зарядов этих фрагментов  $q(R)$  даст соотношение их  $\chi(R)$ : выше будет  $\chi(R)$  того фрагмента, который стягивает в свой атомный бассейн больше электронной плотности и чей заряд, соответственно, ниже. Электронная плотность  $\text{CH}_2$  обладает высокой подвижностью, что стало основанием для исключения  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H--CH}_2$  и  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H--CH}_2$  из молекулярных шкал  $\chi(R)$   $\alpha$ -АМК (2) и  $\alpha$ -аминоальдегидов (3):

$$\begin{aligned} \chi(R) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}), \text{ (в } 1, 3 - 7); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) &< \chi(R), \text{ (в } 2, 9, 10), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(R), \text{ (в } 1' - 3', 5' - 7', 9', 10'); \\ \chi(R) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}), \text{ (в } 4'). \end{aligned} \quad (3)$$

Второй этап сборки заключался в шкалировании  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$  и  $\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$  по одному заместителю. Это позволило объединить молекулярные шкалы  $\chi(R)$  из (2) и (3), содержащие одинаковую  $R$ , а также 8 и 8' из (1):

$$\begin{aligned} \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{SH}) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (1, } 1'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) < \chi(\text{OH}) \text{ (2, } 2'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{C}_6\text{H}_5) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (3, } 3'); \\ \chi(\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (4, } 4'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{OH}) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (5, } 5'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (6, } 6'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{C}_2\text{H}_5\text{S}) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (7, } 7'); \\ \chi(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{--OH}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) < \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) \text{ (8, } 8'), \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) < \chi(\text{C}(\text{O})\text{OH}) \text{ (9, } 9'); \\ \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) &< \chi(\text{H}_2\text{N--C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) < \chi(\text{C}(\text{O})\text{NH}_2) \text{ (10, } 10'). \end{aligned} \quad (4)$$



Переход от качественных шкал электроотрицательностей групп (4) к количественным проведен на третьем этапе. Для этого введены условные расстояния  $l$  в зарядовых единицах для расположенных на шкале  $\chi(R)$  групп;  $l$  рассчитаны из  $q(R)$  соответствующих соединений в а.е. (см. табл. 1). Так, например для первой шкалы  $\chi(R)$  из соотношений (4) они составили:

$$l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{SH}} = |q(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}) - q(\text{SH})| =$$

$$= |-0,031 \text{ а.е.} - (-0,019 \text{ а.е.})| = 0,012 \text{ а.е.}$$

$$l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})-\text{SH}} = |q(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) - q(\text{SH})| =$$

$$= |0,015 \text{ а.е.} - (-0,044 \text{ а.е.})| = 0,059 \text{ а.е.}$$

Таким образом пересчитаны все шкалы  $\chi(R)$  (4) и сведены в табл. 2.

Таблица 2  
Условные зарядовые расстояния  $l$  между заместителем и фрагментами  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$

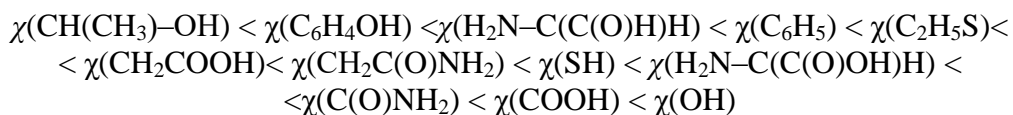
Молекула	Группа	$l \text{ а.е.}$	Группа	$l \text{ а.е.}$	Группа
1, 1'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,059	SH	0,012	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
2, 2'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,034	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$	0,526	OH
3, 3'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,008	$\text{C}_6\text{H}_5$	0,032	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
4, 4'	$\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$	0,004	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,042	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
5, 5'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,005	$\text{CH}_2\text{COOH}$	0,015	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
6, 6'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,014	$\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$	0,032	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
7, 7'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,009	$\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$	0,033	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
8, 8'	$\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$	0,017	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,121	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$
9, 9'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,050	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$	0,140	COOH
10, 10'	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$	0,049	$\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$	0,061	$\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$

Унифицирование шкал  $\chi(R)$  (4) через  $l$  (табл. 2) стало задачей четвертого этапа построения общей шкалы  $\chi(R)$ . Все соотношения (4) обладают одинаковыми группами  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$  с разным  $l$  между ними, зависящим от заместителя. Так в присутствии SH (шкала  $\chi(R)$  (4) для 1 и 1') расстояние  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,071 \text{ а.е.}$  (Таблица 2); наличие OH (2 и 2') приводит к изменению  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,034 \text{ а.е.}$ ; в неравенстве  $\chi(R)$  для 3 и 3' заместителем стала  $\text{C}_6\text{H}_5$  и  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,040 \text{ а.е.}$ ; для соотношения  $\chi(R)$  структур 4 и 4' это  $l$  составляет 0,042 а.е.; молекул 5 и 5' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,020 \text{ а.е.}$ ; для соединений 6 и 6' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,046 \text{ а.е.}$ ; в случае 7 и 7' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,042 \text{ а.е.}$ ; для 8 и 8' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,121 \text{ а.е.}$ ; 9 и 9' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}} = 0,050 \text{ а.е.}$ ; 10 и 10' –  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})-\text{H}_2\text{N}-$

$\chi(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}) = 0,049$  а.е. Однако, для соотношений  $\chi(R)$  молекул 3 и 3', 4 и 4', 7 и 7' величина  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  меняется незначительно (в пределах расчетной погрешности) и расстояние от  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$  до заместителей, а так же их место на общей для этих молекул шкале  $\chi(R)$  не измениться. Что стало поводом для перевода  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  остальных неравенств  $\chi(R)$  в  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  шкалы  $\chi(R)$ , общей для 7 и 7'. Так например, чтобы узнать положение SH на шкале  $\chi(R)$  для 7 и 7' высчитывалось пропорциональное соотношение условных расстояний  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  для 1 и 1' к  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  для 7 и 7' и  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})\text{H}-\text{SH})}$  для 1 и 1' к неизвестному  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})\text{H}-\text{SH})}$  для 7 и 7':

$$\frac{0,071 \text{ а.е.}}{0,042 \text{ а.е.}} = \frac{0,059 \text{ а.е.}}{x \text{ а.е.}}; x = 0,035 \text{ а.е.}$$

Из решения пропорции следует, что SH расположена на шкале  $\chi(R)$  для 7 и 7' на условном расстоянии 0,035 а.е. правее группы  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$  и на 0,007 а.е. левее  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$ . Решение подобных пропорциональных соотношений позволило провести выравнивание  $l_{(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H})\text{H}-\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H})}$  всех шкал  $\chi(R)$  и найти место каждого заместителя на общей шкале  $\chi(R)$  рассмотренных  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -аминоальдегидов:



### Заключение

Оптимизирована геометрия десяти молекул  $\alpha$ -аминокислот и десяти  $\alpha$ -аминоальдегидов. Вычислены заряды  $q(R)$  и объемы  $V(R)$  топологических групп:  $\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ,  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{H})\text{H}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ ,  $\text{CH}_2\text{COOH}$ ,  $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ , SH,  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{C}(\text{O})\text{OH})\text{H}$ ,  $\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ ,  $\text{COOH}$ ,  $\text{NH}_2$ , OH и  $\text{CH}_2$ . Показано снижение  $q(R)$  заместителей,  $\text{NH}_2$ ,  $\text{CH}_2$ , SH при структурном преобразовании  $\alpha$ -АМК в  $\alpha$ -альдегиды. Отмечено уменьшение  $V(R)$  аминогруппы и увеличение для SH и  $\text{CH}_2$  в  $\alpha$ -аминоальдегидах по сравнению с соответствующими  $\alpha$ -АМК. Рассмотрен стерический эффект на  $\text{NH}_2$  со стороны заместителей и выявлено максимальное влияние объема группы  $\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{OH}$ , содержащего третзамещенный атом углерода, на понижение  $V(\text{NH}_2)$ .

Составлены индивидуальные шкалы электроотрицательностей групп рассматриваемых соединений из сопоставлений их парциальных зарядов. Рассмотрено построение общей шкалы  $\chi(R)$  для  $\alpha$ -АМК и  $\alpha$ -альдегидов и представлена ее поэтапная схема сборки с детальным описанием шкалирования групп.

### Список литературы

1. Hughes A.B. Amino Acids, Peptides and Proteins in Organic Chemistry. Volume 3. 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 2011. 583 p. DOI: 10.1002/9783527631803
2. Wu G. Amino Acids in Nutrition and Health. Amino acids in Experimental Medicine and Biology Book V. 1265. Springer Nature Switzerland. 2020. 218 p. DOI: 10.1007/978-3-030-45328-2
3. Wu G. Amino Acids. Biochemistry and Nutrition. Pub.: Boca Raton. 2021. 816 p.
4. Shah M. A. Niaz K., Aslam N. Analysis of proteins, peptides, and amino acids. // In book Recent Advances in Natural Products Analysis. Publisher: Elsevier. 2020. P. 723-747.
5. Saunders T. Cysteine: Sources, Uses and Health Effects. Nova Science Publishers Inc. 2021. 117 P.
6. Williamson D. Phenylalanine: Dietary Sources, Functions and Health Effects. Nova Science Publishers Inc. 2015. 110 p.
7. Acton Q. A. Serine Proteases – Advances in Research and Application. Publ.: Edition: Scholarly. 2012. 86 p.
8. Берман Р.Э., Клигман Р.М. и Дженсон Х.Б. Педиатрия по Нельсону / ред. А.А. Баранов/ М.: «ООО» Рид Элсивер. Т. 1. 2009. 824 с.
9. Сырская А.О., Шаповал Л.Г., Макаров В.А. и др. Аминокислоты глазами химиков, фармацевтов, биологов: в 2-х т. X. «Щедра садиба плюс». 2014. Том 1. 228 с.
10. Zhou G., Pan Y., Guo Y. and Guo J. // Organic Preparations and Procedures Int. 2005. Volume 37. № 1. P. 65–73. DOI: 10.1080/00304940509355402
11. Shatskiy A., Axelsson A., Stepanova E.V. and cet. // Chem. Sci. 2021. V. 12. № 15. P. 5430–5437. DOI: 10.1039/d1sc00658d.
12. Wang H., Zhao X., Li Y., and Lu L. // Organic Letters. 2006. V. 8. № 7. P. 1379–1381. DOI: 10.1021/ol0601186.
13. Sivak I., Toběrný M., Kyselicova A., Caletkova O., Berkeš D., Jakubec P., and Kolarovič A. // J. Org. Chem. 2018. V. 83. P. 15541-15548. DOI: 10.1021/acs.joc.8b02647.
14. Fanelli R., Jeanne-Julien L., René A., Martinez J., Cavelier F. // Amino Acids. 2015. V.47. № 6. P. 1107-1115. DOI: 10.1007/s00726-015-1934-0.
15. Restorp P. Stereoselective Nucleophilic Additions to  $\alpha$ -Amino Aldehydes: Application to Natural Product Synthesis. Stockholm: KTH. 2006 52 p.
16. Ferioli F., Piccinelli F., Porzi G., Sandri S. // Tetrahedron: Asymmetry. 2002. V. 13. № 11. P. 1181–1187. DOI: 10.1016/S0957-4166(02)00262-8.
17. Terauchi T., Kobayashi K., Okuma K., Oba M., Nishiyama K., and Kainosho M. // Organic Letters 2008. V. 10. № 13. P. 2785–2787. DOI: 10.1021/ol800970t.
18. Acton Q.A. Aldehydes – Advances in Research and Application. Publ.: ScholarlyEditions 2013. 939 p.
19. Vogel P., Robina I. Synthesis of Monosaccharides and Analogs. Comprehensive Glycoscience. Elsevier Ltd. 2007. P. 489-582. DOI:10.1016/B978-044451967-2/00014-3

20. Hooper J. F., Seo S., Truscott F. R., Neuhaus J. D., and Willis M. C. // *J. Am. Chem. Soc.* 2016. V. 138. № 5. P.1630–1634.
21. Скобун А.С., Белодедова Ж.В. *Органическая химия. Качественный анализ биоорганических соединений: Лабораторный практикум: учеб. - метод. пособие.* СПб.: НИУ ИТМО; ИХиБТ, 2014. 57 с.
22. Тыжигирова В.В. *Анализ органических соединений из класса альдегидов и кетонов: учебное пособие.* Иркутск: ИГМУ, 2017. 29 с.
23. Adrian-Scotto M., Antonczak S., Bredehöft J. H. // *Symmetry* 2010. V. 2. № 2. P.935-949. DOI:10.3390/sym2020934.
24. Muscat J., Wander A., Harrison N.M. // *Chemical Physics Letters* 2001. V. 342. P. 397-401. DOI:10.1016/S0009-2614(01)00616-9.
25. Van Mourik T., Bühl M., Gageot M.-P. // *Phil. Trans. R. Soc. A.* 2014. V. 372. P. 20120488. DOI: 10.1098/rsta.2012.0488
26. Бейдер Р. *Атомы в молекулах: Квантовая теория.* М.: Мир. 2001. 528 с.
27. Раевский О.А. // *Успехи химии* 1999 Т.68. № 6. С. 555–576.
28. Раевский О.А. *Свойства химических соединений и лекарств как функции их структуры.* КДУ: Добросвет. 2013. 376 с.
29. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *Журнал прикладной химии.* 2011. Т. 84, вып. 9. С. 1578–1580.
30. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *Журнал структурной химии.* 2015. Т. 56. № 1. С. 29–33.
31. Parker S.F.// *Chemical Physics* 2013. V. 424. P. 75-79 DOI: 10.1016/j.chemphys.2013.04.020
32. Li H. *Conformations of amino acids characterized by theoretical spectroscopy.* Royal Institute of Technology, Stockholm, 2014. 96 p.
33. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. *Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP).* Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2007.
34. Todd A. Keith. *AIMAll (Version 11.09.18, Professional),* 2010 (<http://aim.tkgristmill.com>).
35. Русакова Н.П., Завьялова А.Г., Туровцев В.В., Третьяков С.А., Федина Ю.А., Орлов Ю.Д. // *Вестник ТвГУ. Серия: Химия.* 2019. № 4 (38). С. 14–25. DOI: 10.26456/vtchem2019.4.2
36. Русакова Н.П., Курочкин Г.А., Софронова Ю.И., Туровцев В.В. // *Вестник ТвГУ. Серия: Химия.* 2020. № 2 (40). С. 53–61. DOI:10.26456/vtchem2020.2.7
37. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Котомкин А.В. // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология.* 2019. Т. 62. № 10. С. 96–102. DOI: 10.6060/ivkkt.20196210.5964
38. Русакова Н.П., Базулев А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // *Вестник ТвГУ. Серия: Химия.* 2019. № 2 (36). С. 46–55. DOI: 10.26456/vtchem2019.2.1
39. *Свободные радикалы: Тверской государственный университет.* Оф. сайт: <http://aquila.tversu.ru/index.html> (дата обращения: 14.01.2022г).
40. Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Третьяков С.А. // *Вестник ТвГУ. Серия: Химия.* 2019. № 4 (38). С. 7–13. DOI: 10.26456/vtchem2019.4.1

Об авторах:

МАТУС Яна Александровна – студентка пятого курса кафедры физической химии, Тверской государственной университет, г. Тверь, e-mail: [yana-matus1999@mail.ru](mailto:yana-matus1999@mail.ru)

РУСАКОВА Наталья Петровна – кандидат химических наук, доцент кафедры физической химии, Тверской государственной университет, г. Тверь, e-mail: [Rusakova.NP@tversu.ru](mailto:Rusakova.NP@tversu.ru)

ЗАВИЛЕЙСКАЯ Виктория Алексеевна – студентка второго курса магистратуры кафедры физической химии, Тверской государственной университет, г. Тверь, e-mail: [v.a.zavileyskaya@gmail.com](mailto:v.a.zavileyskaya@gmail.com)

ОРЛОВ Юрий Дмитриевич – доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики, Тверской государственной университет, г. Тверь, e-mail: [Orlov.YD@tversu.ru](mailto:Orlov.YD@tversu.ru)

## CHARGES AND VOLUMES OF FUNCTIONAL GROUPS OF AMINO ACIDS AND AMINO ALDEHYDES

Ya.A. Matus, N.P. Rusakova, V.A. Zavileyskaya, Yu.D. Orlov

Tver State University, Tver

Using the «quantum theory of atoms in molecules» (QTAIM), the integral electronic characteristics (charges and volumes) of the functional groups  $\text{NH}_2$ ,  $\text{C}(\text{O})\text{H}$ ,  $\text{SH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ,  $\text{CH}_2\text{COOH}$ ,  $\text{COOH}$ ,  $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-OH}$  and  $\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$  for ten molecules of  $\alpha$ -amino acids and ten of  $\alpha$ -aminoaldehydes are determined. It is shown that a change in the structure (replacement of  $\text{COOH}$  by  $\text{C}(\text{O})\text{H}$ ) reduces the charge of the substituent and the amino group and increases the volume of the  $\text{NH}_2$  group. The electronegativity of the groups are considered, and the steric effect of the volume of the  $\text{CH}(\text{CH}_3)\text{-OH}$  fragment on  $\text{NH}_2$  is established. A qualitative scale of electronegativities of functional groups ( $\chi(R)$ ) of the studied compounds was compiled and a scaling algorithm  $\chi(R)$  was described.

**Keywords:** *electron density, electronegativity, steric effect, «quantum theory of atoms in molecules».*