

Полная исследовательская публикация*Тематический раздел:* Препаративные исследования.*Идентификатор ссылки на объект – ROI:* jbc-01/15-44-10-122*Подраздел:* Супрамолекулярная химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение элементоорганических соединений”

<http://butlerov.com/synthesys/>

УДК 547.233:547.284+547.1'1. Поступила в редакцию 28 августа 2015 г.

Трис(1-амино)трифосфонаты на основе трис(2-аминоэтил)амин: моделирование комплексов с протеиногенными аминокислотами**© Шабалин Константин Васильевич, Мостовая Ольга Александровна,
Адельшина Майя Викторовна и Стойков*⁺ Иван Иванович***Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.**Тел.: (843) 233-74-62. E-mail: ivan.stoikov@mail.ru*

Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку*Ключевые слова:** аминоксфосфонаты, комплексы типа «хозяин-гость», квантовохимическое моделирование.**Аннотация**

Проведено моделирование комплексов трис(1-амино)трифосфонатов на основе трис(2-аминоэтил)амин с протеиногенными аминокислотами. Установлены закономерности влияния заместителя у α -атома углерода на энергию стабилизации и геометрию образующихся комплексов. Определены участки связывания, отвечающие за молекулярное распознавание между трис(1-амино)трифосфонатом и α -аминокислотой.