Тематический раздел: Квантово-химические исследования. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая органическая химия. *Идентификатор ссылки на объект* – ROI: jbc-01/19-57-1-21
Цифровой идентификатор объекта – https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/19-57-1-21
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 12 декабря 2018 г. УДК 544.188; 544.147.4; 544.174.5.

Квантово-химическое моделирование водородных связей в α-глицине

© **Лысенок**[+] **Алёна Александровна**, **Калмыков Павел Алексеевич**, **Гиричева*** **Нина Ивановна**, **Волкова Татьяна Геннадьевна** и **Белкина Елена Георгиевна**

Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет. ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: lisenokalena1996@gmail.com

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: глицин, водородная связь, ИК-спектр, квантово-химические расчеты, теория функционала плотности (DFT).

Аннотация

Методами квантовой химии проведено моделирование фрагмента кристалла α-глицина, состоящего из 5 и 6 молекул глицина. Модель фрагмента кристалла α-глицина была построена с использованием результатов рентгеноструктурных исследований, содержащихся в Кембриджской базе кристаллографических данных (CCDC). Получены теоретические ИК-спектры. Показано, что во фрагменте кристалла молекулы глицина, находящиеся в цвиттер-ионной форме, образуют различные по силе водородные связи типа N-H…O, которым соответствуют разные частоты валентных колебаний ν_{st}(N-H) группы NH_3^+. Полная оптимизация фрагментов кристалла глицина, состоящего из небольшого количества молекул, независимо от метода расчета, приводит к агломерации структуры. Система образует максимально возможное число максимально прочных водородных связей, тем самым понижая общую энергию системы, что приводит к нарушению кристаллической структуры фрагмента, искажению параметров водородных связей в кристалле, и, как следствие, к несистематическому сдвигу частот валентных колебаний N-H. Во избежание этого процесса, дальнейшее моделирование выполнено методом частичной оптимизации геометрии кристаллического фрагмента, при этом положения тяжелых атомов азота, углерода и атомов кислорода были зафиксированы, а варьировались только положения атомов водорода, вовлеченных в образование водородных связей. Методом DFT/B3LYP/6-311G** рассчитаны энергии донорно-акцепторного взаимодействия во фрагменте кристалла, а также частоты его колебаний. Рассчитанные частоты согласуются с тремя экспериментальными частотами в указанной области ИКС. Выполнено сопоставление рассчитанных и экспериментальных частот валентных колебаний N-H группы NH_3^+. По геометрическим характеристикам ВС и энергии донорно-акцепторного взаимодействия между неподеленными электронными парами атомов кислорода и разрыхляющими орбиталями σ*(N-H) установлено, что водородные связи N-H…O между молекулами в одном слое прочнее, чем между молекулами в разных слоях кристалла.