

## Дескрипторы взаимодействия анионов $\alpha$ -аминокислот с нитрофенилбензоатами

© Дорощеева<sup>1</sup> Юлия Сергеевна, Вирзум<sup>2+</sup> Людмила Викторовна,  
Крылов<sup>2\*</sup> Евгений Николаевич

<sup>1</sup> Кафедра фундаментальной и прикладной химии. Ивановский государственный университет.  
ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: +7 (4932) 37-37-03. E-mail: EugenNKrylov@gmail.com  
<sup>2</sup> Кафедра прикладных биотехнологий. Верхневолжский государственный агробиотехнологический  
университет. ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@list.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** анионы аминокислот, нитрофенилбензоаты, теория DFT, электроотрицательность, электронный химический потенциал, жёсткость, мягкость, электрофильность, атомный электростатический потенциал, фронтальные орбитали, реакционная способность.

### Аннотация

Реакционная способность органических соединений изучается различными методами, включая применение теории DFT к количественной теории твёрдых и мягких кислот и оснований и основанной на ней теории индексов реакционной способности DFT. Реакция аминолитиза нитробензоатов  $XPhCOOPhY$  ( $X$ ,  $Y$ -заместители – нитрогруппы) с аминокислотными анионами в водно-спиртовой среде, для которой имеются достоверные кинетические данные о скоростных константах реакции ацилирования, выбрана в качестве модели для применения данного теоретического подхода к анализу реакций нуклеофильного замещения на карбонильном атоме углерода.

На уровне теории DFTM06/6-311++G\*\* с учётом влияния растворителя в рамках метода учёта неспецифической сольватации SMD (Solvent Model based on Density) программный комплекс ADF 2014 рассчитал структуры замещённых нитрофенилбензоатов, нитрофенолятов как вероятных уходящих групп, а также в виде аминокислотных анионов. Заряды рассчитывались по схеме разделения зарядов Хиршфельда, а атомный электростатический потенциал рассчитывался в соответствии с его теоретическим обоснованием. Индексы реактивности DFT рассчитывались на основе их теоретического обоснования с использованием энергий фронтальных орбиталей.

Установлено, что показатели реактивности DFT – электрофильность, электронный химический потенциал, заряд, определённый по схеме Хиршфельда, и атомный электростатический потенциал в реакционном центре, как квантовые химические параметры DFT (ИРС) представляются вполне адекватными дескрипторами реактивности анионов аминокислот и нитрофенилбензоатов при их нуклеофильном взаимодействии. Однако жёсткость как показатель реакционной способности не полностью соответствует взаимодействию аминокислотных анионов с нитробензоатами, так как аминокислотные анионы являются мягкими реагентами, а нитрофенилбензоаты – жёсткими реагентами, поэтому этот параметр не всегда может определять это взаимодействие. Более того, анионы аминокислот не всегда образуют реакционные ряды в смысле теории Гамметта из-за заметных различий в структурах и нарушения принципа линейности свободных энергий, а также, вследствие сочетания кинетических (констант скорости) и термодинамических (IRS) параметров.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Дорощеева Ю.С., Вирзум Л.В., Крылов Е.Н. Дескрипторы взаимодействия анионов  $\alpha$ -аминокислот с нитрофенилбензоатами. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №9. С.1-10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-1

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Дорощеева Ю.С., Вирзум Л.В., Крылов Е.Н. Дескрипторы взаимодействия анионов  $\alpha$ -аминокислот с нитрофенилбензоатами. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-1/ROI-jbc-RA/24-8-3-14

### The output for citing the English online version of the article:

Yulia S. Dorofeeva, Lyudmila V. Virzum, Evgeny N. Krylov. Descriptors of anion interaction  $\alpha$ -amino acids with nitrophenyl benzoates. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.14. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-1/ROI-jbc-A/24-8-3-14