**Конформеры L-глутамина в квантовой теории атомов в молекулах**

***Бойкова С.С.***

*Студентка, 4 курс специалитета*

*ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,*

*химико-технологический факультет, Тверь, Россия*

*E-mail: ka.s.si@mail.ru*

Методом функционала плотности B3LYP (6-311++g(3df,3pd) 10f 6d получено распределение электронной плотности *ρ*(*r*) трех конформеров *L-*стереоизомера глутамина (I *–* III). В состоянии I присутствуют водородные взаимодействия N¨¨H и O¨¨H, в форме II отмечено одно - O¨¨H и в III слабые взаимодействий нет (Рис.). Интегральные электронные характеристики групп (заряд *q*(*R*) и объем *V*(*R*)), полученные в рамках «квантовой теории атомов в молекулах», сведены в таблицу. Ранее подобные расчеты были проведены для конформеров *L-*аспарагиновой и *L-*глутаминовой кислот [1].



Рис.: Состояние I *–* конформер *L*-глутамина с водородными связями (ВС) N¨¨H и O¨¨H, форма II *–* с ВС O¨¨H, конформация III *–* без слабых взаимодействий.

Среди коформеров I*–*III энергетически наиболее выгодным является состояние I, его полная электронная энергия (*Etotal*) минимальна. По сравнению c I в форме II величина *Etotal* выше на 9 кДж/моль, а в III *–* на 16 кДж/моль. Заряд 2NH2 ниже, чем 1NH2, что связано с меньшей электроотрицательностью СО по сравнению с СООН и сопровождается большим оттоком электронной плотности в сторону 2NH2 (Таблица). Водородное взаимодействие N¨¨H в I приводит к оттоку электронной плотности с карбоксильного фрагмента в сторону 1NH2, что сопровождается понижением *q*(1NH2) и повышением *q*(СООН) по сравнению с этими группами в II и III. При наименьшем значении *q*(1NH2) в I ее *V*(1NH2) также самый малый, причиной этого стало наличие N¨¨H и стерического влияния на1NH2 группы СООН.

Таблица. Заряд *q*(R) и объём *V*(R) групп\* L-глутамина

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | COOH | CH | 1NH2  | 1CH2 | 2CH2 | CO | 2NH2 |
| *q*(*R*), а.е. |
| I | -0,125 | 0,369 | -0,316 | 0,080 | 0,079 | 0,262 | -0,350 |
| II | -0,155 | 0,380 | -0,269 | 0,106 | 0,052 | 0,265 | -0,351 |
| III | -0,145 | 0,376 | -0,305 | 0,131 | 0,019 | 0,278 | -0,354 |
| *V(R)*, Å³ |
| I | 45,53 | 13,77 | 25,54 | 22,30 | 22,27 | 26,11 | 26,58 |
| II | 46,02 | 13,83 | 26,74 | 22,01 | 22,58 | 26,16 | 26,62 |
| III | 46,12 | 14,01 | 26,38 | 21,80 | 23,05 | 26,04 | 26,69 |

\* нумерация групп COOH, CH2, и NH2 указана слева направо по молекуле.

***Список литературы:***

1. Бойкова С.С., Матус Я.А., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д. Электронные характеристики групп конформеров кислых L-аминокислот // Химическая термодинамика и кинетика: Сборник научных трудов XII Международной конференции (16-20 мая, г. Тверь, 2022 г), Великий Новгород, 2022. C 73-74.