

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИК СПЕКТРА СУЛЬФОКАТИОНООБМЕННИКА В ФОРМЕ ГЛИЦИНА

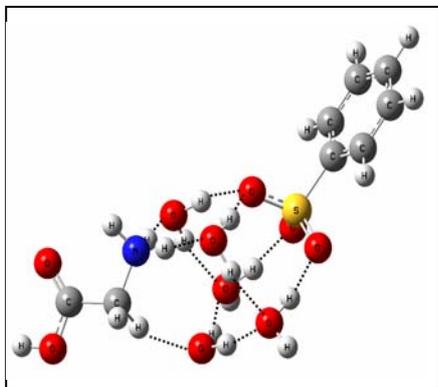
Е.В. Бутырская, Г.М. Белашова, Л.С. Нечаева, В.А. Шапошник,
В.Ф. Селеменев

ГОУ ВПО «Воронежский государственный университет»

304006 Воронеж, Университетская пл., 1

E-mail: bev5105@yandex.ru; lsnechaeva06@yandex.ru

Ионообменники широко применяются в качестве сорбентов при хроматографическом разделении и концентрировании аминокислот. Закономерности их сорбции и характеристики хроматографического разделения могут быть проинтерпретированы на основе компьютерного моделирования структуры и свойств аминокислот и ионообменников. В работе выполнен квантово-химический расчет гидратации цвиттер-иона глицина и структурно-групповой анализ сульфокатионообменника КУ-2 в форме данной аминокислоты. Компьютерное моделирование проведено с использованием программы Gaussian03 методом Хартри – Фока в базисе 6-311G(d,p). При исследовании гидратации к карбоксильной группе и аминогруппе молекулы глицина постепенно добавляли по одной молекуле воды до полного заполнения гидратной оболочки данной аминокислоты. Расчет показал, что при фиксированном количестве молекул воды возможно образование нескольких гидратных структур. Анализ гидратированных структур цвиттер-иона глицина показывает, что наиболее гидрофильной является карбоксильная группа аминокислоты, поскольку ее гидратная оболочка заполняется в первую очередь. Максимальное число гидратации для карбоксильной группы равно 4, а для аминогруппы – 3.



Анализ рассчитанных ИК спектров оптимизированных структур сульфокатионообменника в форме глицина показал, что наблюдается хорошее согласование рассчитанных частот валентных колебаний с экспериментальными значениями для структур, в которых катион глицина отделен от сульфогруппы катионообменника молекулами воды. Оптимизированная структура репрезентативного фрагмента сульфокатионообменника в форме

глицина с гидраторазделенной ионной парой, рассчитанная с 5 молекулами воды, представлена на рисунке. Для структур с контактной ионной парой расхождение теории и эксперимента превышает погрешность определения колебательных частот. Таким образом, структурно-групповой анализ сульфокатионообменника в форме глицина показывает, что энергия активации транспортных процессов в ионообменниках равна сумме энергии разрыва водородной связи между гидратными оболочками противоионов и ионной связи между противоионами. Понимание механизма транспорта позволяет оптимизировать процессы разделения в хроматографическом анализе.