

Применение модели Сокольского для расчета теплоемкости протеиногенных аминокислот и их солей с катионами металлов

ГВУЗ «Ужгородский национальный университет», Ужгород, Украина

Актуальность. Модель Сокольского Ю.М. основана на взаимосвязи теплоемкости кристаллических веществ с волновыми числами валентных колебаний их химических связей. Эта модель характеризуется значительной универсальностью, ведь охватывает как неорганические, так и органические вещества [1]. Однако, границы ее применимости для протеиногенных аминокислот и их солей остаются малоизученными.

Цель работы – оценка применимости модели Сокольского для расчета теплоемкости кристаллических протеиногенных аминокислот и их солей с металлическими катионами.

Материалы и методы исследования. В работе использовалась модель Сокольского Ю.М. [1], основанная на расчетах эффективного числа осцилляторов в кристаллах сложных химических веществ [1, 2].

Результаты и выводы. На первом этапе выполнения работы анализировали возможность применения модели Сокольского Ю.М. для определения теплоемкости кристаллических протеиногенных аминокислот. Рассчитанные по методике [1] величины теплоемкости для двадцати α -аминокислот сравнивали с экспериментальными данными из [3]. В результате установлено, что наименьшие отличия расчета от эксперимента наблюдаются для глицина (0,76 %), аланина (6,29 %), лейцина (9,43 %) и лизина (3,55 %). Для остальных ациклических

аминокислот различия между расчетом и экспериментом превышают 10 %. Также отметим, что при переходе к циклическим аминокислотам отклонения резко увеличиваются и становятся выше 30 %. Очевидно, для структур с циклическими объединениями атомов модель Сокольского требует усовершенствования.

Из [2] следует, что наилучшее согласие расчета теплоемкости с экспериментом наблюдается для неорганических солей щелочных и щелочноземельных металлов. Для таких соединений соответствующие отклонения находятся в интервале 0,57–3,16 %. Как известно из [1], метод Сокольского применим не только к неорганическим, но и к органическим кристаллическим веществам. Поэтому, в данном случае, можно ожидать наивысшую точность в прогнозировании свойств именно для солей глицина, аланина, лейцина и лизина с катионами щелочных и щелочноземельных металлов. В качестве примеров приведем расчетные величины теплоемкости для некоторых из них. Так, для натрий глицината H_2NCH_2COONa и натрий аланината $CH_3CH(NH_2)COONa$ получены значения 122,5 и 152,5 Дж/(моль×К), а для барий глицината $(H_2NCH_2COO)_2Ba$ и барий аланината $(CH_3CH(NH_2)COO)_2Ba$ – соответственно 245,0 и 305,0 Дж/(моль×К). Экспериментальная теплоемкость этих веществ нам неизвестна. Однако из изложенного выше вытекает, что для рассмотренных солей натрия и бария отклонения расчетных значений от экспериментальных вероятно будут находиться в интервале 1–6 %.

Таким образом, применение модели Сокольского для некоторых протеиногенных аминокислот дает хорошее согласие расчетной теплоемкости с экспериментальной. Есть основания полагать, что рассмотренный подход вполне применим и для их солей с металлическими катионами. Использование метода Сокольского для других аминокислот и их солей требует оптимизации соответствующей модели.

Литература

1. Сокольский Ю.М. Числа осцилляторов в кристаллах сложных химических веществ. *Журнал физической химии*. 1982, 56(3), 722–724.
2. Козьма А.А. Про хвильові числа валентних коливальних хімічних зв'язків метал-оксиген у неорганічних солях із оксоаніонами. *Наук. вісник Ужгородського у-ту. Серія «Хімія»*. 2015, 1(33), 18–21.
3. Мревлишвили Г.М. Низкотемпературная калориметрия биологических макромолекул. *Успехи физических наук*. 1979, 128(2), 273–312.