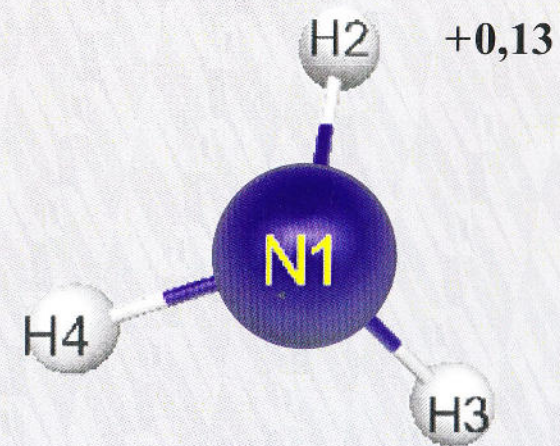


КИСЛОТНАЯ СИЛА,  
ЭЛЕКТРОННОЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ  
СТРОЕНИЕ УНИКАЛЬНЫХ  
МЕДИЦИНСКИХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

*СБОРНИК СТАТЕЙ*



УДК 577.175.522

ББК 24.5я43

К32

Ответственный редактор

аспирант *Д. С. Андреев* (Себряковский филиал ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет»)

Рецензенты:

доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и прикладной химии ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет» *В. Т. Фомичёв*;

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики волновых процессов ФГАОУ ВПО «Волгоградский государственный университет»

*Р. Г. Федун*

**Кислотная сила, электронное и геометрическое строение уникальных**  
К32 **медицинских химических соединений [Текст] : сб. ст. / под ред. асп. Д. С. Андреева ; Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. проф. образования «Волгогр. гос. архит.-строит. ун-т». Себряк. фил., г. Михайловка, Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования «Первый Московский гос. мед. ун-т им. И. М. Сеченова». – Волгоград : Изд-во ВолГУ, 2014. – 55 с.**

ISBN 978-5-9669-1324-3

В сборнике представлены квантово-химические расчёты классическим методом АМ1 некоторых уникальных медицинских молекулярных систем, таких, как, например, соединений, за которые получены Нобелевские премии: бензилпенициллин, ДДТ, витамин В<sub>2</sub> и др., которые до настоящего времени не были выполнены. Конечная цель представленных расчётов – разработка нанотехнологий поиска новых более эффективных пенициллинов, витаминов, инсектицидов и т. п. Предложенные результаты расчётов уникальных медицинских молекулярных систем – первый шаг к разработке новых нанотехнологий.

Настоящий сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей вузов, бакалавров, магистров, соискателей, аспирантов и докторантов химических факультетов классических и др. университетов.

УДК 577.175.522

ББК 24.5я43

ISBN 978-5-9669-1324-3

© Авторы статей, 2014

© ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет». Себряковский филиал, 2014

© ГОУ ВПО «Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова», 2014



## СОДЕРЖАНИЕ

|  |    |
|--|----|
| 1. Пристанков А.А., Белоусова В.С. Бензилпенициллин. Строение. Кислотная сила. Квантово-химический расчет.....   | 4  |
| 2. Пристанков А.А., Белоусова В.С. Аденозинтрифосфат. Строение. Универсальной показатель кислотности. Квантово-химический расчет.....  | 10 |
| 3. Пристанков А.А., Белоусова В.С. α-глюкоза. Строение. Универсальной показатель кислотности. Квантово-химический расчет.....  | 15 |
| 4. Пристанков А.А., Белоусова В.С. Аммиак. Структура. Универсальной показатель кислотности. Квантово-химический расчет.....  | 20 |
| 5. Пристанков А.А., Белоусова В.С. Витамин В <sup>2</sup> . Структура. Кислотная сила. Квантово-химический расчет.....   | 24 |
| 6. Пристанков А.А., Игнатов А.В., Белоусова В.С. Дихлордифенилтрихлорметилметан – инсектицид. Структура. Универсальный показатель кислотности. Квантово-химический расчет..... | 30 |
| 7. Пристанков А.А., Игнатов А.В., Белоусова В.С. Лизергиновая кислота. Строение. Кислотная сила. Квантово-химический расчет.....   | 35 |
| 8. Пристанков А.А., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Белоусова В.С. Папаверин. Структура. Универсальный показатель кислотности. Квантово-химический расчет.....                    | 40 |
| 9. Пристанков А.А., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Белоусова В.С. Циклогексан. Структура. Универсальный показатель кислотности. Квантово-химический расчет.....                  | 46 |
| 10. Пристанков А.А., Игнатов А.В., Бахолдин И.И., Белоусова В.С. Формальдегид. Структура. Кислотная сила. Квантово-химический расчет.....                                      | 50 |