

УДК 544.183.264/544.187 + 54-386 ÷ 546.72 ÷ 546.56 ÷ 546.711 + 546.47

А.И. Герасимчук, Е.К. Трунова, Е.А. Мазуренко, Т.А. Макотрик

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРОЕНИЯ СТЕРЕОИЗОМЕРОВ
ЭТИЛЕНДИАМИНДИАНТАРНОЙ КИСЛОТЫ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С 3d-МЕТАЛЛАМИ**

Проведены квантово-химические расчеты электронного и геометрического строения двух оптически активных изомеров *l*- и *s*-этилендиаминдиантарной кислоты и ее комплексов с 3*d*-переходными металлами — Fe (III), Cu (II), Mn (II), Zn (II) — полуэмпирическими методами ZINDO/1. По результатам оценки энтальпии образования и полной энергии молекулы *эддя* установлено, что *s*-структура является более устойчивой, чем *l*-структура. *S*-форма *эддя* имеет свернутую конформацию за счет расположения amino- и СН-групп в cis-положении относительно этиленового мостика и является более способной к комплексообразованию. Квантово-химические расчеты комплексов 3*d*-металлов с различными лигандными формами *эддя* показали, что наиболее устойчивы комплексы с *s*-*эддя* вследствие образования устойчивых хелатных циклов (пятичленный — псевдоэтилендиаминовый, 2 глициновых и два шестичленных β-аланиновых).

В последнее время все большее внимание уделяется изучению биологически активных координационных соединений с новыми комплексами, содержащими фрагменты природных аминокислот и обладающими биологической активностью. Среди них особое место занимает этилендиаминдиантарная кислота (*эддя*, H₄L), которая содержит в своей молекуле остатки янтарной и аспарагиновой кислот.

Этилендиаминдиантарная кислота характеризуется наличием в молекуле асимметричного атома углерода метиновой группы (C^{*}). Благодаря этой особенности *эддя* может существовать в виде двух оптически активных изомеров: правовращающего (*l*-форма) и левовращающего (*s*-форма). Максимальная дентатность ее равна 6 за счет наличия в молекуле *эддя* 4 карбоксильных групп и 2 вторичных атомов азота. Проявляя свойства стереоспецифичного лиганда, этилендиаминдиантарная кислота образует координационные соединения, имеющие как пяти-, так и шестичленные циклы.

Научный и практический интерес представляют комплексы *эддя* с ионами 3*d*-металлов (Fe (III), Cu (II), Zn (II), Mn (II)); являясь биологически активными соединениями, они находят применение в различных областях сельского хозяйства и медицины [1—3].

Наши исследования по изучению фрагментации *эддя* и фотохимической активности ее комплексов с 3*d*-металлами [4, 5] показали возможность стереометрической подвижности молекулы лиганда прежде всего в области NH-, C–N- и C–O-групп.

Показано, что при разложении комплексоната и ее комплексов с металлами в первую очередь происходит разрыв связей этиленового мостика с аминокислотными группами и группами COOH с образованием набора аминокислотных фрагментов и аминокислот.

Однако в литературе отсутствуют данные о геометрическом и электронном строении изомеров молекулы *эддя* и ее комплексов с 3*d*-металлами. Подобные сведения необходимы для выбора наиболее реакционноспособной формы комплексона и определения ее комплексообразующей способности с 3*d*-металлами для дальнейшего определения условий образования наиболее энергетически выгодной конформации лиганда и направленного проведения синтеза комплексонатов заданного состава. Данная работа посвящена исследованию *эддя* и ее комплексов с Fe (III), Cu (II), Zn (II), Mn (II) методами квантовой химии.

Квантово-химические расчеты молекул *эддя* и ее комплексов с металлами проводились полуэмпирическими методами ZINDO/1 [6]. С помощью оптимизации геометрии молекул устанавливалась их оптимальная геометрическая структура. Оценка энтальпии образования комплексов проводилась на основании расчетных величин для лиганда и соответствующих величин для комплексов металлов. Рассчитывалась величина энергетического зазора (ΔE) между верхней заполненной молекулярной орбиталью (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбиталью (НВМО), что важно для интерпретации электронных спектров поглощения. Рассчитывались заселенности на атом-

ных орбиталей и заряды на атомах молекулы *эдда* и ее комплексов с металлами Fe (III), Cu (II), Zn (II), Mn (II), что позволяло судить о пространственном распределении электронной плотности в указанных молекулах, насыщенности связей, валентной активности определенных атомов и групп.

Электронное и геометрическое строение молекулы этилендиаминдиантарной кислоты. Геометрическое строение молекулы *эдда* оптимизировалось методом молекулярной механики MM+, затем полученная в результате оптимизации геометрическая структура была исходной для оптимизации геометрии молекулы на основе метода ZINDO/1. В результате оптимизации получена линейная симметричная геометрическая структура *l*-формы *эдда* (рис. 1). Отличительной особенностью данной структуры является наличие трех равноценных осей инверсии. Вдоль одной из осей молекула ориентирована симметрично относительно этиленового мостика, то есть центр инверсии расположен в точности посередине связи CH₂–CH₂. С помощью метода ZINDO/1 оценены основные энергетические характеристики молекулы

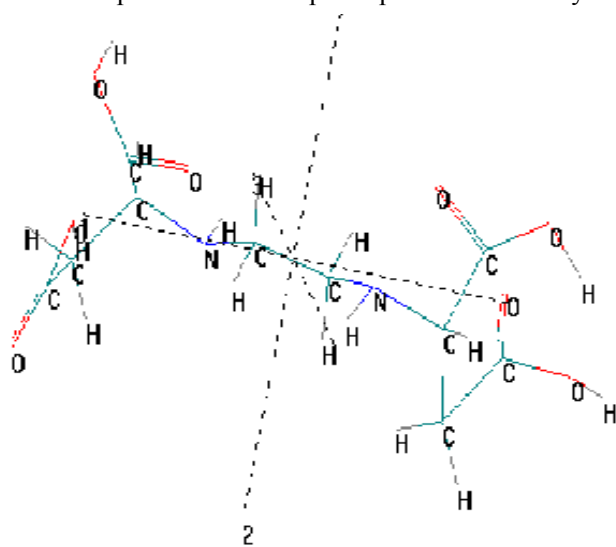


Рис. 1. Геометрическое строение молекулы *эдда* (*l*-изомер): 1, 2, 3 — оси инверсии.

l-*эдда*: энтальпия образования (–6452.55 ккал/моль); полная энергия молекулы (–146439.4219 ккал/моль) и энергетический зазор ($\Delta E=11.819$ эВ).

Поиск глобального минимума на энергетической поверхности молекулы *эдда* привел к более устойчивой форме, каковой является *s*-структура, изображенная на рис. 2. Аналогично расчетам для *l*-формы *эдда*, для *s*-формы также были оценены энтальпия образования, полная энергия молеку-

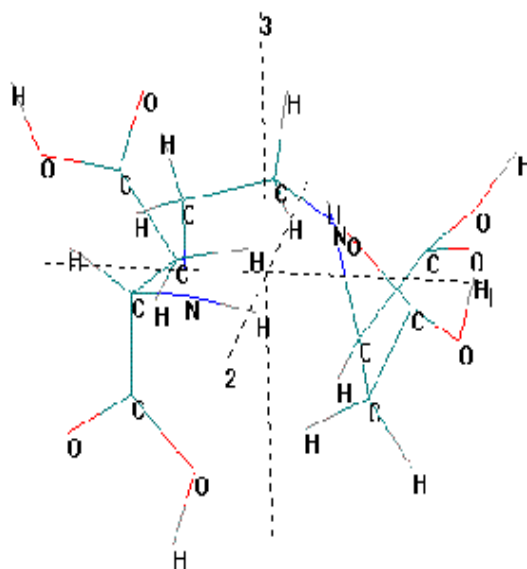


Рис. 2. Геометрическое строение молекулы *эдда* (*s*-изомер): 1, 2, 3 оси инверсии.

лы и энергетический зазор ΔE , равные соответственно –6550.9856 ккал/моль; –146533.5625 ккал/моль; 13.609 эВ. Поскольку энергия связи для *s*-структуры на 94 ккал/моль больше соответствующего значения для *l*-структуры, именно *s*-форма *эдда* является более устойчивой.

Длины связи и параметры электронной заселенности (Q) этиленового мостика и основных атомных групп обеих форм этилендиаминдиантарной кислоты приведены в табл. 1.

Из расчетных данных видно, что в *s*- и *l*-структурах *эдда* существенно отличаются значения длины связей и зарядовые распределения групп, расположенных ближе к этиленовому мостику. Длина связи самого этиленового мостика несколько больше для *s*-, чем для *l*-структуры. Наиболее существенное различие двух изомерных форм комплекса состоит в расположении amino- и α -карбокисильных групп (то есть карбокси-групп при метиловом атоме углерода) относительно этиленового мостика. В *s*-изомере α -COOH-группы расположены в *цис*-, а в *l*-изомере — в *транс*-положениях. При переходе *l*-конформера в *s*-форму изменяется угол связи ОСО в карбоксигруппах и группах C_HNC_H₂, при этом происходит “сворачивание” молекулы в *s*-структуру, в результате чего донорные группы образуют компактную координационно-активную область. Эта область определяет *s*-структуру как наиболее реакционноспособную для образования координационных соединений.

Общая тенденция изменения геометрии и элект-

Т а б л и ц а 1

Характеристики строения и электронного распределения *l*- и *s*-форм этилендиаминдиантарной кислоты

Расчетный параметр	<i>l</i> -форма	<i>s</i> -форма
Полная энергия, ккал/моль	-146439.42	-146533.56
Энергетический зазор, эВ	11.82	13.609
Теплота образования, ккал/моль	6452.55	6550.99
Энергия связи, ккал/моль	-9701.82	-9795.99
Длина / кратность связи, Å/1:		
C–C этиленового мостика	1.4878 / 1.0222	1.4927 / 1.0266
C _{et} –N	1.4262 / 1.0100	1.4441 / 0.9437
N–C _{ac}	1.4339 / 0.9991	1.4763 / 0.8499
C _{CH} –C _{CH₂}	1.5010 / 0.9640	1.5014 / 0.9072
C _{CH} –C _{COOH}	1.5103 / 0.9478	1.48580 / 0.8631
C _{CH₂} –C _{OOH}	1.4491 / 1.0666	1.46830 / 0.9985
C–CH=O	1.3247 / 1.3103	1.3136 / 1.3478
C–CH–O _H	1.3951 / 0.9046	1.3847 / 0.9329
C–CH–OO–H	1.0177 / 0.9229	1.0177 / 0.9190
C–CH ₂ =O	1.3082 / 1.4550	1.3233 / 1.3276
C–CH ₂ –O _H	1.3386 / 1.1620	1.3779 / 0.9756
C–CH ₂ –OO–H	1.0186 / 0.9036	1.0173 / 0.9238
Атомная единица заряда:		
Q C _{et} / QN	0.053 / -0.318	0.079 / -0.151
Q C _{CH} / Q C _{CH₂}	0.045 / -0.161	0.028 / -0.242
Q C–CH / QO	0.513 / -0.635	0.512 / -0.589
Q –CH–O / QH	-0.425 / 0.221	-0.422 / 0.240
Q C–CH ₂ / QO	0.541 / -0.269	0.529 / -0.597
Q –CH ₂ –O / QH	-0.308 / 0.276	-0.396 / 0.236

тронного строения таково, что в *s*-форме по сравнению с *l*-формой:

- увеличиваются длина и заселенность C–C связи этиленового мостика;
- увеличивается длина и уменьшается заселенность связей углерод–азот как со стороны этиленового мостика, так и со стороны карбоксильных групп;
- изменение положения карбокси-групп сопровождается небольшими изменениями длин заселенностей связей в них, и при увеличении длины связи происходит уменьшение электронной заселенности.

Расчетными методами получены значения энтальпий образования и ступенчатого депротонирования *s*- и *l*-форм *эдда* (табл. 2).

Из данных табл. 2 видно, что

энергетически более устойчивой структурой является *s*-форма *эдда*, так как значения ΔH последовательного депротонирования донорных групп для *s*-конформера значительно ниже, чем для *l*-формы.

По значениям ΔH были рассчитаны значения констант диссоциации различных лигандных форм. Константы диссоциации рассчитывали по уравнению

$$\ln K_{ij} = -\Delta H_{ij}/RT + \Delta S_{ij}/R, \quad (1)$$

величины ΔS_{ij} получали из соотношения

$$\Delta S_{ij} = \lambda \Delta H_{ij}/R, \quad (2)$$

где λ — изокINETическая постоянная.

Результаты расчета приведены в табл. 3, из которой видно, что расчетные значения констант диссоциации очень близки к значениям, определенным экспериментальным путем различными физико-химическими методами исследования [3].

Электронное и геометрическое строение комплексов Mn (II), Fe (III), Cu (II), Zn (II) с этилендиаминдиантарной кислотой. Произведенные квантово-химические расчеты комплексов Mn (II), Fe (III), Cu (II), Zn (II) с оптически активными формами *эдда* позволили получить энергетические характеристики для комплексов каждого металла с соответствующей лигандной формой (табл. 4).

Как видно из данных табл. 4, значе-

Т а б л и ц а 2

Расчетные значения теплот образования и ступенчатого депротонирования (в ккал/моль) изомерных форм этилендиаминдиантарной кислоты

Форма лиганда	<i>l</i> -форма		<i>s</i> -форма	
	<i>H</i>	$\Delta H = H_{LH(i-)} - H_{LH(i)}$	<i>H</i>	$\Delta H = H_{LH(i-1)} - H_{LH(i)}$
LH ₄	-6456.819161		-6550.992605	
L _{COO} H ₃	-6271.758192	185.0609689	-6349.555196	201.4374087
L _{COO} H ₂	-5955.901837	315.8563555	-6062.868834	286.6863618
L _{COO} H ₁	-5627.213923	328.6879132	-5721.813758	341.0550756
L _{COO}	-5299.867592	327.3463316	-5315.031629	406.7821299
L _N H	-4704.276222	595.59137	-4754.825471	560.2061582
L _N	-4563.810172	140.4660501	-4816.094570	61.2690992

Т а б л и ц а 3

Значения констант диссоциации этилендиаминдиантарной кислоты

Форма лиганда	<i>l</i> -форма		<i>s</i> -форма		Данные [7] lgK
	lnK	lgK	lnK	lgK	
L _{COO} H ₃	6.85	2.97	6.22	2.70	2.95
L _{COO} H ₂	7.13	3.10	7.40	3.21	
L _{COO} H ₁	7.11	3.08	8.83	3.83	3.88
L _{COO}	8.94	3.87	9.69	4.21	
L _N H	12.93	5.61	12.16	5.28	6.83
L _N	19.72	8.54	17.77	7.72	9.96

Т а б л и ц а 4

Расчетные энергетические характеристики (в ккал/моль) комплексов металлов с *эдда*

Форма комплекса	Полная энергия (ΔG)	Энергия связи	Теплота образования	$\Delta H_{\text{компл}}$
MnH ₂ (<i>l</i> -L _{COO})	-155039.80	-9526.69	-6318.19	-175.81
MnH ₂ (<i>s</i> -L _{COO})	-154439.95	-9529.19	-6424.89	-464.91
Mn(<i>l</i> -L _N H)	-154041.74	-9130.987	-6026.68	-1322.40
Mn(<i>s</i> -L _N H)	-153790.40	-9180.81	-6128.62	-1373.79
Mn(<i>l</i> -L _N)	-153378.93	-8769.34	-5717.15	-1012.88
Mn(<i>s</i> -L _N)	-153395.35	-9086.94	-6086.85	-1270.75
FeH ₂ (<i>l</i> -L _{COO})	-158798.03	-9438.39	-6302.49	-342.51
Fe(<i>s</i> -L _{COO})	-160005.66	-10043.66	-6803.56	-661.19
Fe(<i>l</i> -L _N H)	-158682.38	-9322.73	-6186.84	-1482.56
Fe(<i>s</i> -L _N H)	-158504.35	-9445.88	-6362.09	-1607.26
Fe(<i>l</i> -L _N)	-158129.92	-9071.45	-5987.65	-1012.87
Fe(<i>s</i> -L _N)	-158026.81	-9269.51	-6237.82	-1421.73
CuH ₂ (<i>l</i> -L _{COO})	-178239.44	-9665.76	-6548.46	-588.48
Cu(<i>s</i> -L _{COO})	-179263.11	-10087.08	-6865.58	-723.21
Cu(<i>l</i> -L _N H)	-178011.53	-9437.85	-6320.56	-1616.28
Cu(<i>s</i> -L _N H)	-177729.73	-9457.23	-6392.04	-1637.21
Cu(<i>l</i> -L _N)	-177324.36	-9051.86	-5986.67	-1282.39
Cu(<i>s</i> -L _N)	-157858.33	-9101.04	-6069.35	-1253.25
ZnH ₂ (<i>l</i> -L _{COO})	-146031.05	-9876.22	-6808.46	-848.48
ZnH ₂ (<i>s</i> -L _{COO})	-146975.70	-10218.51	-7046.54	-904.17
Zn(<i>l</i> -L _N H)	-145733.83	-9579.00	-6511.23	-1806.95
Zn(<i>s</i> -L _N H)	-145708.63	-9854.98	-6839.31	-2084.49
Zn(<i>l</i> -L _N)	-145404.58	-9550.93	-6535.27	-1830.99
Zn(<i>s</i> -L _N)	-177355.10	-9383.77	-6370.68	-1554.59

ния полной энергии молекул комплексов с разнопротонированными *l*- и *s*-формами *эдда* увеличиваются от Zn²⁺ к Cu²⁺ в ряду Cu²⁺ > Fe³⁺ ≥ Mn²⁺ > Zn²⁺. При этом, не зависимо от изомера этилендиаминдиантарной кислоты, для каждой комплексной формы рассматриваемых металлов значения полной энергии молекул примерно одинаковы, хотя для *s*-изомеров ΔG , как правило, имеют более низкие значения. И только для комплексов с L_N-формой лиганда ΔG_s выше ΔG_l приблизительно на 20000 ккал/моль. Аналогично изменятся и значения энергии связи в молекулах комплексонатов, которые примерно одинаковы для всех комплексных форм. Наиболее низкие значения ΔG и энергии связи имеют комплексы с депротонированной формой L_N *эдда*. Следовательно,

именно эти комплексы являются наиболее устойчивыми за счет координирования ионами металлов депротонированных амино-групп лиганда и образования свернутой энергетически выгодной структуры.

Теплоты образования комплексов и ΔH комплексообразования изменяются в ряду Zn²⁺ < Fe³⁺ ≈ Mn²⁺ < Cu²⁺, причем значения ΔH наибольшее для комплексов с H₂L_{COO}-формой *эдда*. При этом для *l*-изомеров значения энтальпии на несколько порядков выше, чем для соответствующих *s*-изомеров. Аналогичная закономерность в изменении значений ΔH наблюдается и для комплексов с L_{NH} и L_N-формами комплексона, из чего можно сделать вывод о большей энергетической устойчивости *s*-комплексов *эдда*. В работе [8] были экспериментально определены значения энтальпии образования комплексов меди с *s*-формой этилендиаминдиантарной кислоты: $\Delta H_{\text{CuL}} = -1230.05$ ккал/моль. По нашим расчетам значение ΔH для этой формы комплекса равно -1253.25 ккал/моль, что удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными. Поэтому можно считать, что квантово-химические расчеты для комплексов 3*d*-металлов с изомерными формами *эдда*, произведенные нами, являются вполне достоверными.

Различные термические характеристики для различных комплексов, по всей вероятности, связаны с координацией разного числа функциональных групп *эдда*. Большой экзотермический эффект, наблюдающийся при образовании дипротонированных комплексов, обусловлен координацией только карбоксильных групп без изменения основности ато-

ма азота. При этом уменьшается дентатность лиганда. Низкие значения ΔH , характерные для форм M_{LNH} и M_{LN} , связаны с координацией центральными атомами не только карбоксильных, но и NH-групп *эдда*. Причем близость основных термодинамических характеристик указывает на аналогичность строения комплексов для всех металлов.

На рис. 3, *а, б* приведены модельные структуры комплексов *3d*-металлов с $H_2(l-L_{COO})$ - и $(s-L_N)$ -формами *эдда* соответственно, построенные по данным расчетных энергетических параметров

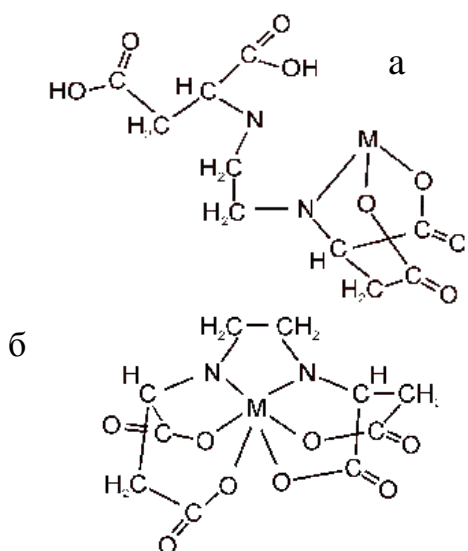


Рис. 3. Строение комплекса металла:
а — с l_{H_2L} -формой *эдда*; *б* — с s_{L_N} -формой *эдда*.

комплексов. Как видно из рис. 3, *а*, в депротонированном комплексе этилендиаминдиантарная кислота координирована к иону металла аспарагиновым фрагментом и образует два цикла: пяти- и шестичленные. В комплексах с депротонированными формами лиганда (рис. 3, *б*) реализуется свернутая октаэдрическая структура, в которой образуются три пятичленных (два глициновых (Gly) и один псевдоэтилендиаминный (En)) и два шестичленных β -аланиновых (Al) цикла. Средние плоскости двух Gly-циклов лежат в экваториальной плоскости полиэдра. Центральный En-цикл и два сопряженных Al-цикла образуют сопряженную систему, располагаясь почти перпендикулярно экваториальной плоскости (аксиальной).

На основании величин теплот комплексообразования, с использованием уравнения (1), нами были рассчитаны значения констант устойчивости различных комплексных форм *3d*-металлов (табл. 5). Как видно из таблицы, теоретически рассчитанные константы устойчивости для комплек-

Т а б л и ц а 5

Расчетные значения констант устойчивости комплексов Fe (III), Cu (II), Mn (II), Zn (II) с этилендиаминдиантарной кислотой

Металл	Форма лиганда	$\lg K_{уст}$	$\lg K_{уст}$ (эксперимент)
Fe (III)	$H_2(l-L_{COO})$	3.23	—
	$H_2(s-L_{COO})$	6.24	7.60 [9]
	$(l-L_NH)$	9.55	—
	$(s-L_NH)$	13.41	12.20 [9]
	$(l-L_N)$	13.98	—
	$(s-L_N)$	15.16	18.71 [9]
Cu (II)	$H_2(l-L_{COO})$	5.55	—
	$H_2(s-L_{COO})$	6.82	4.15 [10]
	$(l-L_NH)$	12.09	—
	$(s-L_NH)$	11.82	12.08 [10]
	$(l-L_N)$	15.24	—
	$(s-L_N)$	15.44	18.75 [10]
Mn (II)	$H_2(l-L_{COO})$	1.66	—
	$H_2(s-L_{COO})$	4.38	2.98 [11]
	$(l-L_NH)$	9.55	—
	$(s-L_NH)$	11.98	10.84 [11]
	$(l-L_N)$	12.47	—
	$(s-L_N)$	12.96	12.94 [11]
Zn (II)	$H_2(l-L_{COO})$	8.00	—
	$H_2(s-L_{COO})$	8.52	2.97 [12]
	$(l-L_NH)$	17.04	—
	$(s-L_NH)$	14.66	7.96 [12]
	$(l-L_N)$	17.26	—
	$(s-L_N)$	19.65	13.81 [12]

сов *3d*-металлов с этилендиаминдиантарной кислотой достаточно хорошо согласуются с экспериментально полученными величинами $\lg K_{уст}$. Наибольшие отличия наблюдаются для цинковых комплексов, для комплексов Fe (III) и Mn (II) теоретические и экспериментальные значения $\lg K_{уст}$ близки. Различные значения в константах устойчивости рассматриваемых комплексов (как теоретически рассчитанных, так и экспериментально определенных), скорее всего, связаны с различным строением электронных оболочек переходных металлов. Энергетически более стабильными являются комплексы Zn (II), поскольку ион цинка имеет заполненную *d*-оболочку (d^{10}) и искажение октаэдрической структуры в таких комплексах минимально. Наименьшие значения энтальпии комплексообразования имеют комплексы Cu^{2+} (d^9), что можно объяснить сильным искажением октаэдри-

ческой структуры комплексов за счет эффекта Яна-Теллера и, возможно, более эффективной координацией ионом Cu^{2+} части функциональных групп *еддя*. Энергетические характеристики для комплексов Fe (III) и Mn (II) практически одинаковы и занимают промежуточное положение между комплексами Zn (II) и Cu (II), что закономерно, поскольку ионы Fe^{3+} и Mn^{2+} имеют наполовину заполненные внешние *d*-орбитали (d^5).

При формировании 3*d*-оболочки в рассматриваемом ряду координационные связи металлов с функциональными группами комплексона упрочняются по мере завершения этой структуры. Средние расстояния связей M–O и особенно M–N для шестивершинных комплексонатов металлов, скорее всего, будут минимальными для меди, что и приводит к максимальному тепловому эффекту образования комплексов CuL .

Таким образом, анализ проведенных квантово-химических расчетов геометрического строения двух изомеров (*l*- и *s*-) этилендиаминдиантарной кислоты и ее комплексов с 3*d*-переходными металлами (Fe (III), Cu (II), Mn (II), Zn (II)) показал, что *s*-*еддя* структура является более устойчивой, чем *l*-структура. *S*-форма *еддя* имеет свернутую конформацию за счет расположения амино- и СН-групп в *цис*-положении относительно этиленового мостика и является более способной к комплексообразованию. Комплексы 3*d*-металлов с *еддя* имеют форму в меньшей или большей степени (в зависимости от природы металла) искаженного октаэдра и за счет высокой экзотермичности их образования являются устойчивыми соединениями.

РЕЗЮМЕ. Проведено квантово-хімічні розрахунки електронної та геометричної будови двох оптично активних ізомерів (*l*- та *s*-)молекули етилендіаміндіантарної кислоти та її комплексів з 3*d*-перехідними металами — Fe (III), Cu (II), Mn (II), Zn (II) — полупемпіричними методами ZINDO/1. За результатами оцінки ентальпії утворення та повної енергії молекули *еддя* було встановлено, що *s*-структура є більш стійкою, ніж *l*-структура. *S*-форма *еддя* має звернуту конформацію за рахунок розташування аміно- та СН-груп у *цис*-положенні відносно етиленового містка і найбільш здатна до комплек-

соутворення. Квантово-хімічні розрахунки комплексів 3*d*-металів з різними лігандними формами *еддя* показали, що більш стійкими є комплекси з *s*-*еддя* за рахунок утворення стійких хелатних циклів (п'ятичленні — псевдоетилендіаміновий, 2 гліцинових і два шестичленні β-аланінових).

SUMMARY. Quantum-mechanical semi-empiric ZINDO/1 calculations of two optical isomers (*l* and *s*) ethylenediaminedisuccinate acid (*edds*) stereoisomers were performed as well for their 3*d* transition metal complexes Fe (III), Cu (II), Mn (II), Zn (II). Geometrical and electronic parameters are estimated. *S*-ethylenediaminedisuccinate is more stable compared to *l*-isomer according to enthalpy and free energy data. *S*-form adopts twisted conformation due to *cis*-position of amino- and CH-groups at ethylene-bridge and this form of *edds* is more able to complexation. Complexes with *S*-*edds* are the most stable among others in a view of formation of stable chelate rings (five-membered pseudo-ethylenediamine, 2 glycinate and 2 β-alaninate).

1. Островская Л.К. // Журн. ВХО им. Д.И. Менделеева. -1984. -**29**, № 3. -С. 32—37.
2. Мазуренко Е.А., Трунова Е.К. // Укр. хим. журн. -2001. -**67**, № 7. -С. 24—32.
3. Гудков И.М., Груша В.В., Грисюк С.М. та ін. // Наук. вісн. НАУ. -2004. -№ 79. -С. 233—238.
4. Мазуренко Е.А., Роговцов А.А., Трунова Е.К., Герасимчук А.И. // Укр. хим. журн. -2000. -**66**, № 8. -С. 76—79.
5. Трунова Е.К., Роговцов А.А., Мазуренко Е.А. и др. // Там же. -2001. -**67**, № 1. -С. 7—11.
6. Anderson W.P., Cundari T.R., Drago R.S., Zerner M.C. // J. Inorg. Chem. -1990. -**29**. -P. 1—24.
7. Majer J., Joke V., Dvorakova E., Jurkova M. // Chem. Zvesty. -1968. -**22**, № 6. -P. 415—423.
8. Чернявская Н.В., Лыткин А.И., Никольский В.М. // Журн. неорганической химии. -2004. -**49**, № 5. -С. 854—857.
9. Гороховатская М.Я., Тананаева Н.Н., Костромина Н.А., Трунова Е.К. // Журн. теорет и эксп. химии. -1990. -**26**, № 2. -С. 196—201.
10. Васильев В.П., Катровцева А.В., Никольский В.М. // Журн. неорганической химии. -1998. -**43**, № 4. -С. 808—812.
11. Трунова Е.К., Гороховатская М.Я., Роговцов А.А., Микитенко Д.Н. // Укр. хим. журн. -2000. -**66**, № 6. -С. 84—87.
12. Васильев В.П., Зайцева Г.А., Шишлянникова Л.В. // Журн. неорганической химии. -1989. -**34**, № 1. -С. 92—96.

Институт общей и неорганической химии им. В.И. Вернадского НАН Украины, Киев

Поступила 07.05.2008