

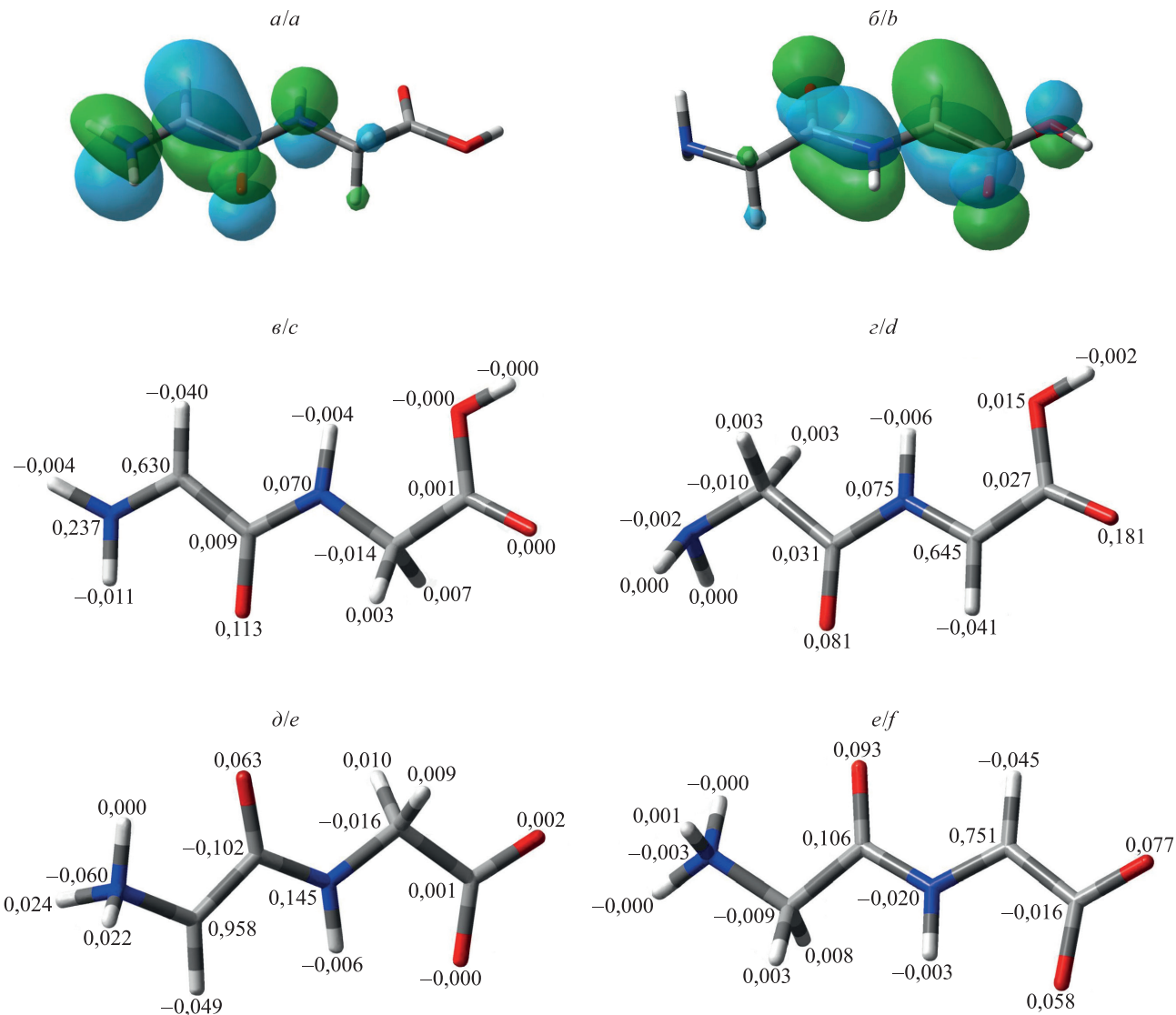


Рис. 7. Изоповерхности однократно занятых молекулярных орбиталей радикалов глицил-глицина, полученных при отрыве атома водорода от α -атома углерода N-концевого (а) и C-концевого (б) аминокислотных остатков. Расчетные значения спиновой плотности по Малликену в радикалах глицил-глицина, полученных при отрыве атома водорода от α -атома углерода N-концевого (в, д) и C-концевого (з, е) аминокислотных остатков в газовой фазе (в, з) и водном растворе (д, е)

Fig. 7. Isosurfaces of the singly occupied molecular orbitals of glycyl-glycine radicals obtained by hydrogen atom abstraction from the α -carbon atom of the N-terminal (a) and C-terminal (b) amino acid residues. Calculated values of the Mulliken spin density in glycyl-glycine radicals obtained by hydrogen atom abstraction from the α -carbon atom of the N-terminal (c, e) and C-terminal (d, f) amino acid residues in the gas phase (c, d) and aqueous solution (e, f)