

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ МЕЖДУ ИХ СТРУКТУРОЙ И КОНСТАНТАМИ ПРОТОНИРОВАНИЯ

Рукк Н.С., Шамсиев Р.С., Скворцова М.И., Осипов Р.А.,
Замалютин В.В., Обухова А.Ю.

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского, д. 86,
тел. (495) 936-89-12, e-mail: roukkn@inbox.ru, r.a.osipov@gmail.com

Ранее [1] нами была количественно рассмотрена способность к протонированию слабого органического основания и биологически активного лиганда – антипирина. С целью оценки способности к протонированию, которую можно рассматривать как характеристику склонности лигандов к образованию комплексных соединений, методом функционала плотности (DFT, программа «Природа» [2], обменно-корреляционный функционал PBE, 3z-базис) были рассчитаны энергии протонирования для ряда органических лигандов различного состава и строения. Показано, что родственные соединения характеризуются близкими значениями энергии протонирования, тогда как переход к соединениям других классов сопровождается ее изменением, что позволяет установить критерий возможности (или невозможности) комплексообразования.

Кроме того, при помощи программного комплекса *Wolfram Mathematica 8*, нами был построен ряд моделей связи «структура-свойство» для констант K протонирования некоторых органических лигандов. Эти модели представляют собой линейные уравнения вида $\log K = a_1x_1 + \dots + a_nx_n + a_0$, где x_1, \dots, x_n – некоторые структурные параметры молекул, а a_0, \dots, a_n – некоторые константы, подбираемые по обучающей выборке соединений. В качестве x_1, \dots, x_n были использованы такие молекулярные параметры как число атомов водорода, отношение числа атомов углерода к числу неводородных атомов, индекс Винера и др. [3]. Наилучшие 300 моделей из построенных 4000 моделей были использованы для оценок констант протонирования двух соединений, для которых отсутствуют экспериментальные данные.

Литература

1. Рукк Н.С., Михайлов В.А., Осипов Р.А., Скрябина А.Ю., Замалютин В.В. Математическая модель и программа для расчета констант образования комплексов. – XVIII Международная конференция «МАТЕМАТИКА. КОМПЬЮТЕР. ОБРАЗОВАНИЕ». Пущино, 24-29 января 2011 г. Тезисы докладов. С. 86.
2. Laikov D.N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // *Chem.Phys.Lett.* **281**, 1997. P.151-156.
3. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефирова Н.С. Топологические индексы в органической химии // *Успехи химии.* **LVII**, №3, 1988. С. 337-366.