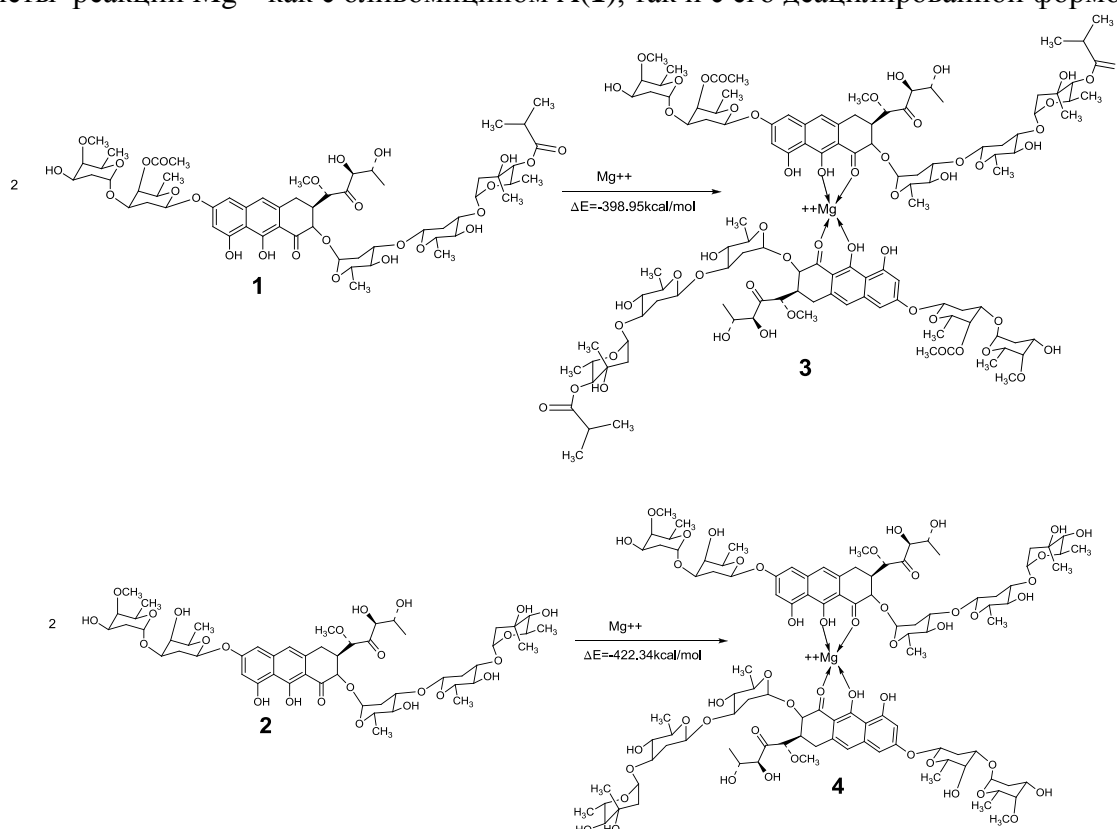


# КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ ОЛИВОМИЦИНА с $Mg^{2+}$

Е.Е.Быков, А.Н. Тевяшова, М.Н. Преображенская

Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков им. Г.Ф.Гаузе  
РАМН, Москва, Россия e-mail: evgen-bykow@yandex.ru

Оливомицин является природным антибиотиком из группы ауреоловой кислоты. Он проявляет высокую цистостатическую активность, что связано с образованием комплексов с GG- богатыми участками в узкой бороздке ДНК [1]. Экспериментально доказано участие в образовании этих комплексов ионов  $Mg^{2+}$ . В целях более детального изучения структуры вышеупомянутых комплексов, нами были проведены квантовохимические расчёты реакции  $Mg^{2+}$  как с оливомицином А(1), так и с его деацелированной формой 2.



Согласно данным квантовохимического неэмпирического расчёта по методу Хартри-Фока в базе 3-21G полная энергия образования бидентатного комплекса  $Mg^{2+}$  с деацелированной формой оливомицина 2 на 23 ккал/моль ниже полной энергии образования бидентатного комплекса с оливомицином А (1). Причина более лёгкого, согласно результатам расчёта, образования магниевого бидентатного комплекса со структурой 4 вероятно связана с тем, что молекула 2 даёт более компактную структуру 4 в которой, в отличие от структуры 3 имеют место более короткие расстояния O---H между соседними OH-группами соседних ди- и трисахаридных фрагментов рассчитанного комплекса

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 10-03-00210-а

## Литература

[1] Л.Г.Брикенштейн В.Х., Патина Л.Р., Баренбойм Г.М.  
и др. // Мол. биол. 1984. Т. 186. С. 1606–1616.