

# Квантово-химическое изучение диссоциации солей трииндолилметилия

Е.Е. Быков<sup>а</sup>, Н.Д. Чувылкин<sup>б</sup>, С.Н. Лавренов<sup>а</sup>, М.Н. Преображенская<sup>а</sup>

<sup>а</sup>НИИНА им.Г.Ф. Гаузе РАМН, Россия, 119021, Москва, Б.Пироговская, 11а.

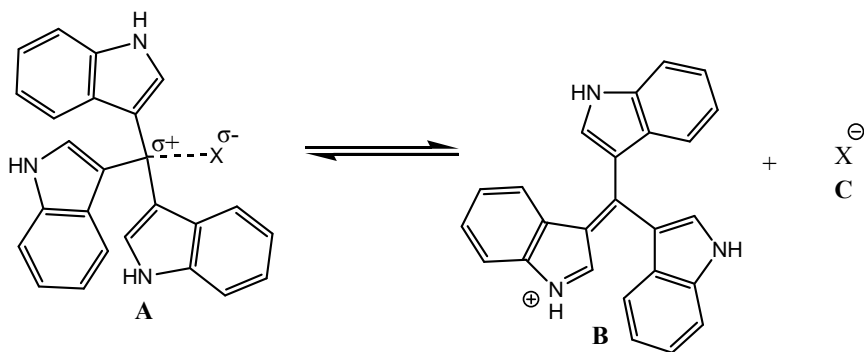
E-mail: evgen-bykov@yandex.ru

<sup>б</sup>ИОХ РАН им.Н.Д. Зелинского, Россия, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

**Ключевые слова:** квантово-химические расчеты, метод B3LYP/6-31+G(d), соли трииндолилметилия, гетеролитическая диссоциация.

Соли три(индол-3-ил)метилия обладают высокой цитотоксической активностью и являются новым классом противоопухолевых соединений [1]. С целью обоснования подбора противоиона для оптимизации растворимости таких солей в воде нами исследованы энергии гетеролитической диссоциации ряда соединений трииндолилметилия, имеющих в своём составе различные противоионы (схема 1).

**Схема 1.** Гетеролитическая диссоциация солей три(индол-3-ил)метилия



X = OH, Cl, OCO(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>COOMe, OAc, OAcCl<sub>2</sub>, OSO<sub>2</sub>Me, OSO<sub>3</sub>H, OPO<sub>3</sub>H<sub>2</sub>

Квантово-химические расчёты соединений **A** и образующихся в ходе их диссоциации катионов **B** и анионов **C** (схема 1), проведённые в рамках теории функционала плотности методом B3LYP/6-31+G(d) как для газовой фазы, так и с моделированием растворителя (вода) методом SM5.4 [2], показали, что найденные значения энергии диссоциации практически линейно зависят как от вычисленных значений дипольного момента солей **A**, так и от литературных значений показателя кислотности pK<sub>a</sub> кислот, сопряжённых анионам **C**. С ростом рассчитанных значений дипольного момента солей и с понижением величин pK<sub>a</sub> наблюдается понижение энергии диссоциации в исследуемом ряду. Эта тенденция соблюдается как для газовой фазы, так и при модельном учёте растворителя.

1. S. N. Lavrenov, Y. N. Luzikov, E. E. Bykov, M. I. Reznikova, E. V. Stepanova, V. A. Glazunova, Y. L. Volodina, V. V. Tatarsky, Jr., A. A. Shtil, M. N. Preobrazhenskaya, *Bioorg. Med. Chem.*, 2010, **18**, 6905.

2. Marenich A. V., Olson R. M., Kelly C. P., Cramer C. J., Truhlar D. G. *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, 3, 2011.

Работа поддержана грантом РФФИ 10-03-00210-а и грантом Президента РФ НШ-5290-2010.4.