

## ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ ОКТАКАТИОННОГО МЕТАЛЛОФТАЛОЦИАНИНА

Холина Е.Г., Нестеренко А.М., Зленко Д.В., Коваленко И.Б.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991,  
Москва, Ленинские горы 1, корп.12, +7 (495) 939-02-89, tenarra@mail.ru

Молекулы класса металлофталоцианинов используются в качестве красителей, катализаторов и биосенсоров [1]. В медицинских целях металлофталоцианины предполагаются к использованию в качестве терапевтических агентов при антимикробной фотодинамической терапии. В связи с этим важной задачей является изучение процессов адсорбции октокаатионного металлофталоцианина ( $ZnPc,8+$ ) на бактериальной мембране грам-отрицательных бактерий методами молекулярного моделирования.

Молекула  $ZnPc,8+$  обладает способностью к адсорбции на отрицательно заряженной поверхности бактериальной мембраны грам-отрицательных бактерий благодаря наличию в своем составе восьми положительно заряженных остатков холина. В силу особенностей синтеза образец  $ZnPc,8+$  представляет собой смесь изомеров с различным положением заместителей в макроциклическом ядре. Поэтому для построения модели нами были оценены наиболее вероятные позиции остатков холина в молекуле. Для этого мы рассчитали вероятности последовательного электрофильного присоединения заряженных остатков к макроциклическому ядру при помощи функций Фукуи.

На основе функций Фукуи, а также на основе стерических соображений, нами были предложены три принципиально различные молекулы, которые могут быть хорошо представлены в смеси изомеров. Для каждой из этих молекул была построена топология. Создание топологии включало в себя оптимизацию геометрии молекулы в базе *ss-pVDZ* в рамках теории функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом *B3LYP5*. Затем рассчитывался электростатический потенциал в равновесной геометрии в точках поверхности Конноли, парциальные заряды на атомах подбирались до воспроизведения *ab initio* электростатического потенциала. Квантово-механические расчеты были выполнены с помощью программного пакета *Firefly* [2], расчет точечных зарядов на атомах был произведен на основе алгоритма *RESP* [3].

### Литература

1. Z. Liu, X. Zhang, Y. Zhang, J. Jiang Theoretical investigation of the molecular, electronic structures and vibrational spectra of a series of first transition metal phthalocyanines. *Spectrochimica Acta Part A* 2007, 67, 1232–1246.
2. Alex A. Granovsky, *Firefly* version 8.0.0, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
3. C.I. Bayly, P. Cieplak, W.D. Cornell, P.A. Kollman A Well-Behaved Electrostatic Potential Based Method Using Charge Restraints For Determining Atom-Centered Charges: The *RESP* Model. *J. Phys. Chem.* 1993, 97, 10269-10280.