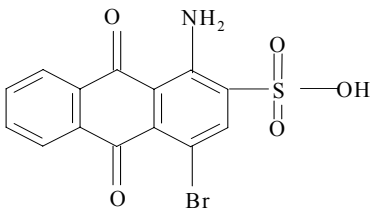
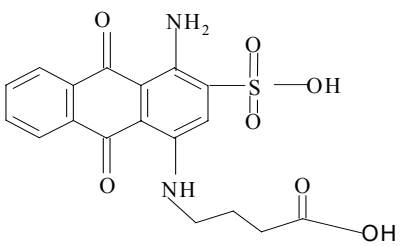
ПОРІВНЯЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РЕАКЦІЙНОЇ ЗДАТНОСТІ ПОХІДНИХ 9,10-АНТРАХІНОНУ ЗА ДОПОМОГОЮ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

Федорів М.З., Тарас Т.М., Федорів А.С.
Прикарпатський національний університет ім. Василя Стефаника, pavush@rambler.ru

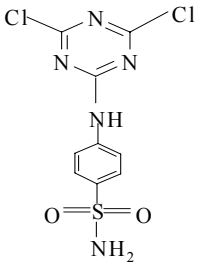
Заміщений 9,10-антрахінон є важливим структурним компонентом різноманітних антрациклінових антибіотиків, що володіють протипухлинними властивостями. Існують протипухлинні препарати, що містять S-триазиновий фрагмент, які проявляють широкий спектр фармакологічної активності. Саме тому нам було цікаво поєднати антрахіноновий та S–триазиновий фрагменти з метою одержання нових біологічно активних речовин. В якості антрахінонового фрагменту було заплановано застосувати 1-аміно-4-бромантрахінон-9,10-2-сульфокислоту (технічна назва - бромамінова кислота) (I) та бромамінову кислоту, в якій атом брому заміщений нуклеофільним реагентом (II). В якості S-триазинового фрагменту використовується 4-(4,6-диихлоро(1,3,5)-триазин-іламіно)бензолсульфонамід (III).



(I)



(II)



(III)

З метою дослідження взаємодії методом комп'ютерного моделювання між сполуками (I) і (III) та (II) і (III) проведено обґрунтування можливості протікання реакції нуклеофільного заміщення за допомогою квантово-хімічних розрахунків.

Розрахункові дані ефективних зарядів на реакційних центрах сполуки (I) та (II), показують, що позитивний заряд на атомі нітрогену в положенні 1 речовини (I) більший (0,085), ніж в положенні 1 речовини (II) (0,04). Цим самим можна припустити, що сполука (I) більш реакційно здатна. Щодо речовини (II), квантово-хімічними розрахунками показано наявність більш позитивного заряду атома нітрогену в положенні 4 – 0,049, що зумовлює виникнення реакційного центру даної сполуки саме в цьому положенні. Проте теоретично можна припустити, що стеричні затруднення будуть визначальними.

Практично отримано продукт взаємодії сполук (I) і (III). Реакція проходить в середовищі фенолу при 150ºС протягом чотирьох годин.

При проведенні реакції між сполуками (II) і (III) в аналогічних умовах заміщення не проходить.

ВИКОРИСТАННЯ КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ У МОДЕЛЮВАННІ МЕХАНІЗМІВ ФОРМУВАННЯ ЗАБОРОНЕНИХ ПЕРЕХОДІВ У МОЛЕКУЛІ ОЗОНУ

Хоменко О.М.
Черкаський державний технологічний університет, homenko@uch.net

В даній роботі показано роль нижніх збуджених триплетних станів молекули озону, а саме $^3A_2$ стану, в спектрі його поглинання. Значна увага до таких досліджень пояснюється тим, що триплетні стани озону пов'язані з кінетикою процесів утворення та дисоціації $O_2+O \Leftrightarrow O_3$ і тому є важливими для фотохімії атмосфери [1,2]. Знання інтенсивності синглет-триплетних (S-T) переходів у спектрі поглинання озону дозволяють передбачати вплив спінових ефектів на реакції рекомбінації та розкладу молекули O_3.