

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИСЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ DFT  
ПЛАТИНЫ С ПРОИЗВОДНЫМИ ПИРИДИНА***Гигава А.М., Веселов И.Н.*Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

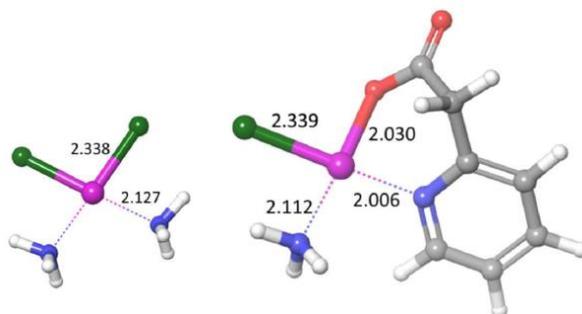
Комплексы платины (II) с органическими лигандами широко используются в качестве противораковых средств за счет их высокой токсичности. Вместе с тем проводится много исследований с целью сделать противоопухолевые препараты более избирательными, уменьшить их негативное влияние на здоровые клетки и ослабить влияние ферментов на эти комплексы.

Производные пиридина широко распространены в живой природе, и играют важную роль в функционировании живых организмов. Использование вместо одного из лигандов пиридина либо его производных делает комплекс в числе прочего более устойчивым к разрушающим ферментам, что позволяет уменьшить дозировки препарата, тем самым снижая общий вред.

Отдельной задачей можно назвать моделирование данных комплексов квантово-химическими методами, в частности, методом функционала плотности (DFT), поскольку в ней большую роль играет выбор корректной пары функционал – базисный набор.

В работе были смоделированы несколько комплексов (лигандами выступали 2-(2-пиридил)бензимидазол, 2-(2-пиридил)бензоксазол и 2-(2-пиридил)бензотиазол) с использованием различных пар функционал – базисный набор, два из которых представлены на рисунке.

В качестве маркера для проверки корректности выбора функционала и базисного набора, а также получаемых результатов был выбран цисплатин, представляющий собой простой и хорошо изученный комплекс.



Структурные формулы цисплатина ( $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ ) и  $[\text{PtCl}(\text{pyAc-N,O})(\text{NH}_3)]$   
(B3LYP-D3/ LACV3P++\*\*)

Для комплексов были рассчитаны геометрия молекул, парциальные атомные заряды и ИК-спектры, проведено сравнение расчетных данных с экспериментальными, рассмотрено влияние заместителей на характер связи Pt–NH<sub>3</sub>.