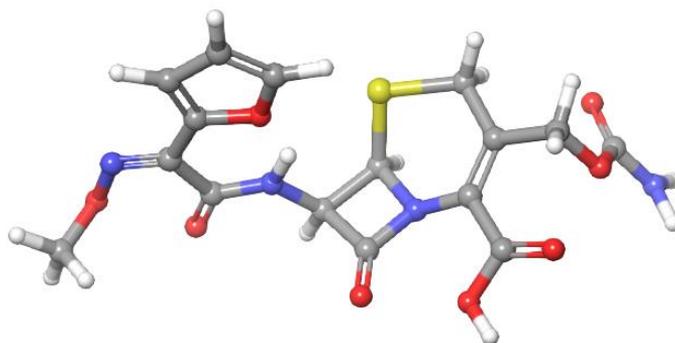


**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ DFT
КОМПЛЕКСОВ ЦЕФУРОКСИМА С Cu(II) И Zn(II)***Сутугина К.А., Веселов И.Н.*Тверской государственный университет
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

Цефуроксим (см. рисунок) относится к цефалоспориновым антибиотикам II поколения. Несмотря на наличие в настоящий момент новых поколений (III-V), он часто используется в медицине благодаря активности в отношении широкого спектра возбудителей и низкой токсичности.



Цефуроксим

Как и другие цефалоспорины, цефуроксим является производным 7-аминоцефалоспороновой кислоты, содержащей β -лактамное кольцо. Данные соединения способны образовывать разнообразные по своей структуре комплексы с рядом металлов, что в ряде исследовательских работ использовалось как средство модификации фармакологических, токсикологических и физико-химических свойств цефалоспориновых антибиотиков.

Объектом исследования в данной работе являлись комплексы цефуроксима (CRX, см. рисунок) и ряда металлов (Cu(II) и Zn(II)) общего вида $[M(CRX)_2]$. В качестве метода был выбран квантово-химический метод функционала плотности (DFT), позволяющий достаточно точно смоделировать структуру соединения и рассчитать некоторые физические величины. Для корректного воспроизведения структуры был проведен подбор используемых функционала и базисного набора.

В результате моделирования была рассчитана геометрическая структура комплексов и их ИК-спектры, выполнено сравнение экспериментальными данными, в том числе соотношением линий. В результате рассчитанные и реальные значения показали хорошую сходимость, что доказывает корректность выбора V3LYP-D3/LACV3P++ в качестве пары функционал / базисный набор.

Кроме того, для оценки оптической активности этих комплексов были рассчитаны молекулярные орбитали HOMO и LUMO.