КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ НОВОГО ЗАМЕЩЕННОГО АРИЛКАРБАМАТА В ОТНОШЕНИИ СУПЕРОКСИД АНИОН-РАДИКАЛА

М.Н. Коляда¹, К.П. Пашенко², Ю.Д. Минина²

¹Южный научный центр РАН, 344006, Россия, Ростов-на-Дону, ул. Чехова, 14.

²ФГБОУ ВО «Астраханский государственный технический университет»,
414056, Россия, Астрахань, ул. Татищева, 16.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-485

E-mail: mnkolyada@mail.ru

Известно, что функционально замещенные арил- и гетарилкарбаматы перспективны в качестве потенциальных пролекарств с широким спектром фармакологической активности [1]. В данной работе проведено квантово-химическое моделирование антирадикальной активности нового замещенного арилкарбама-та (**1**) (рис. 1), в сравнении с ионолом (**2**) - известным фенольным антиоксидантом, в отношении супероксид анион-радикала ($O_2^{\cdot-}$) – исходной реактивной формы кислорода в живом организме.

1

2

Рис. 1. Структура исследуемых фенольных соединений

Антирадикальную активность исследуемых соединений в отношении $O_2^{\cdot-}$ оценивали, моделируя их взаимодействие с данной реактивной формой кислорода по схеме: $ROH + O_2^{\cdot-} = RO^{\cdot} + HO_2^-$

Расчет энергетических эффектов (ΔE) реакций, проведенный методом функционала плотности с использованием программы Gaussian 09, показал, что значение ΔE для реакции соединения **1** с $O_2^{\cdot-}$ составляет 108,8 кДж/моль, для реакции ионола с $O_2^{\cdot-}$ – 68,5 кДж/моль. Таким образом, в рамках используемого модельного подхода новый замещенный арилкарбамат уступает ионолу по способности к «нейтрализации» $O_2^{\cdot-}$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-03-00006.

Литература

[1] K.T. Hansen, P. Faarup, and H. Bundgaard, J. Pharm. Sci. 1991, 80, 793–798.