



ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ Cu(II) И Ag(I) С ЦЕФУРОКСИМОМ

Сутугина К. А.

ТвГУ, ХТФ, Кафедра неорганической и аналитической химии

Научный руководитель: Веселов И. Н.

Цефуроксим – цефалоспориновый антибиотик кислотного типа с широким спектром антибактериальной активности. Входит в перечень жизненно необходимых и важнейших лекарственных препаратов медицинского назначения.

Квантово-химическим методом функционала плотности (DFT) были исследованы комплексы цефуроксима с Cu(II) и Ag(I).

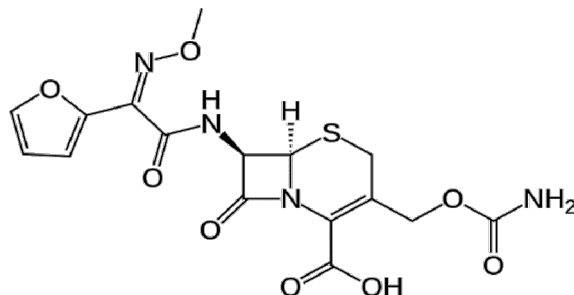


Рис.1. Структурная формула цефуроксима

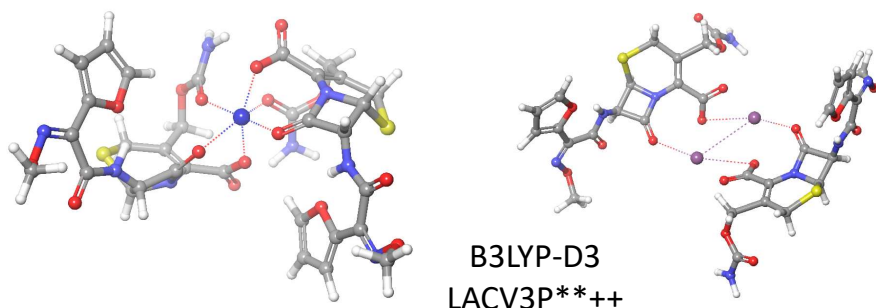


Рис.2. Комплекс с Cu(II)

Рис.3. Комплекс с Ag(I)

	-O carbox	=O lact	=O carbam
Cu	1.95	2.41	2.40
Ag	2.45	2.61	-

Табл.1. Расстояние от ионаметалла до лиганда

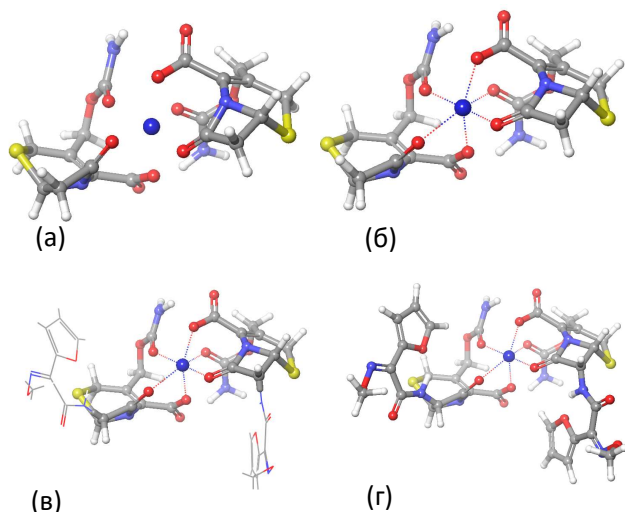


Рис.4. Поэтапное моделирование

В результате методом DFT были оптимизирована модельная структура комплексов, рассчитаны геометрические характеристики. Для подтверждения правильности структуры были рассчитаны ИК-спектры соединений и выполнено соотнесение модельных линий с известными из экспериментальных данных.

Методика расчета: Из-за того, что комплекс содержит много атомов (89), моделирование проводилось поэтапно, в начале «отрезав» боковую группу, которая не участвует в комплексообразовании, оставив только бета-лактамное кольцо и близлежащие атомы. После того, как геометрия данного комплекса была оптимизирована, боковые группы были добавлены и геометрия снова пересчитана (позиции атомов центральной части не замораживались). Поскольку при втором расчете геометрия центральной части определена, изменения в ней незначительные, общая структура рассчитывается быстрее, что позволило значительно ускорить время расчета.

Для комплекса серебра была предложена структура состава $[Ag_2(CRX)_2]$ в которой два иона серебра образуют мостики между атомом кислорода карбонильной группы β -лактамного кольца одного лиганда и карбоксилатной группой другого лиганда. При этом карбаматная группа в комплексообразовании не участвует.