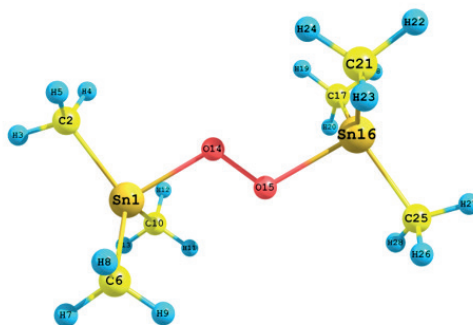


КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
КАТИОНОВ ТРИМЕТИЛОЛОВА(IV) С СУПЕРОКСИД  
АНИОН-РАДИКАЛОМКоляда М.Н.,<sup>a</sup> Пашенко К.П.,<sup>b</sup> Сенкевич М.А.,<sup>b</sup> Пименов Ю.Т.<sup>b</sup><sup>a</sup>Южный научный центр РАН,  
344006, Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41,  
e-mail: mnkolyada@mail.ru<sup>b</sup>Астраханский государственный технический университет, 414056, Астрахань, ул. Татищева 16

Одним из механизмов токсичности металлов является индуцирование металлами активных форм кислорода (АФК). Ранее *in vitro* установлено нивелирование способности гемолизата эритроцитов крысы утилизировать первоначальную АФК в живом организме - супероксид анион-радикал ( $O_2^{\cdot-}$ ) в присутствии ксенобиотика хлорида триметилолова(IV). В настоящей работе проведено квантово-химическое моделирование взаимодействия между катионами триметилолова(IV) (ТМТ) - продуктами диссоциации исходного токсиканта - и  $O_2^{\cdot-}$ . Расчеты проводились методом функционала плотности (функционал и базис: V3LYP/CEP-31) с использованием программы Gaussian 98. Весьма важным для рассматриваемой системы является учет эффекта растворителя (воды), что было реализовано в расчетах с помощью модели поляризуемого континуума (PCM). Оптимизированная геометрия продукта реакции, протекающей по схеме  $2TMT^+ + O_2^{\cdot-} \rightarrow [(TMT)_2O_2]^+$ , имеет вид:



Продукт реакции представляет собой катион-радикал, в котором атомы олова и кислорода лежат практически в одной плоскости. Показано, что энергетический эффект указанного выше взаимодействия составляет: 307,8 кДж/моль (в растворителе) и 918,3 кДж/моль (без учёта растворителя), т.е. реакция сопровождается выделением энергии, и с термодинамической точки зрения должна протекать легко.

Таким образом, результаты квантово - химических расчетов свидетельствуют о возможности *in vivo* взаимодействия между катионами триметилолова(IV) и супероксид анион-радикалом с образованием АФК с металлоорганическими фрагментами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-03-00434.