

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12465

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОГО ПРЕПАРАТА ФЕНИБУТ*Аскарлов Ибрагим Рахманович**д-р. хим. наук, профессор,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: stek@inbox.ru**Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович**PhD, доцент,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: muhamatdin@mail.ru**Обидова Шохсанам Акрамжон кизи**магистрант, кафедра Химии,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан*RESEARCH OF THE ELECTRONIC STRUCTURE
OF THE BIOLOGICALLY ACTIVE PREPARATION PHENIBUT*Ibragim R. Askarov**DSc, professor, Department of chemistry,
Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan**Mukhamatdin Kh. Mamarakhmonov**PhD, Associate professor, department chemistry,
Andijan State University
Republic of Uzbekistan, Andijan**Shokhsanam Obidova**Second course Master, Department Chemistry
Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan*

АННОТАЦИЯ

Современным методом квантовой химии изучено электронное строение препарата Фенибут, широко применяемого при нервных расстройствах живого организма. Установление реакционной способности может помочь в изучении биологической активности.

ABSTRACT

The electronic structure of the drug Phenibut, which is widely used in nervous disorders of a living organism, has been studied by the modern method of quantum chemistry. Establishing reactivity can help in the study of biological activity.

Ключевые слова: фенибут, нервные расстройства, биологическая активность, квантово-химический расчет, метод DFT-D3LYP, геометрия молекулы, электронная структура.

Keywords: phenibut, nervous disorders, biological activity, quantum-chemical calculation, DFT-D3LYP method, geometry, electronic structure.

Объектом данного исследования является Фенибут (β -фенил- γ -аминомасляная кислота) **1**, биологически активное вещество, производное γ -аминомасляной кислоты. Активен в отношении А- и В-рецепторов γ -аминомасляной кислоты, а также рецепторов фенилэтиламина [1]. Биологическая активность молекулы определяется нахождением в молекуле ароматического кольца и двух важных функциональных групп для живых организмов: карбоксильной и аминогрупп. Препарат зарегистрирован в медицинской практике как анксиолитическое и ноотропное средство; его применяют при различных нервных расстройствах, таких как беспокойство, бессонница, посттравматический стресс, депрессия, заикание и др. [1, 2].

Представляет большой теоретический интерес изучение перераспределения с высокой точностью

электронных зарядов на атомах, которое обуславливает реакционную способность вещества.

Нами использован квантово-химический метод V3LYP с базисным набором 3-21G, использованный нами ранее для исследования гетероароматических систем [3-6]. В ходе расчетов все геометрические параметры молекулы были подвергнуты полной оптимизации. Полученные численные данные представлены в тысячных единицах, для удобства сопоставления и точного вывода результатов.

Ароматическая группа в оптимизированной молекуле имеет плоскую форму, о чем свидетельствуют рассчитанные торсионные углы ароматического фрагмента. На рисунке 1, показана условная нумерация и перераспределение атомных зарядов в молекуле фенибут в схематичном виде, для удобства анализа данных.

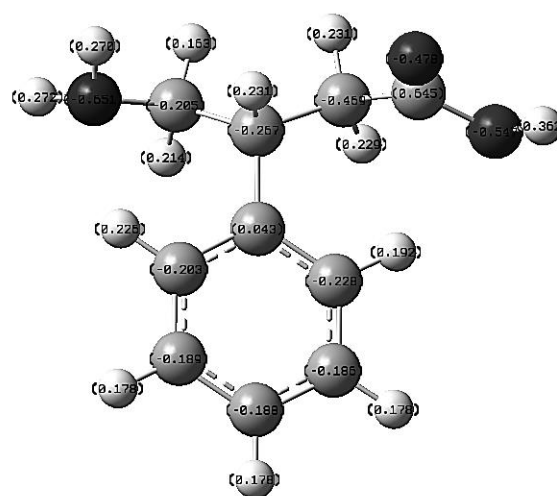
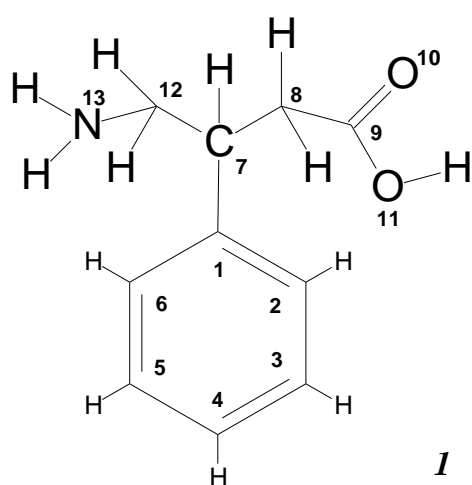


Рисунок 1. Нумерация атомов и распределение заряда на атомах в молекуле

Например, торсионные углы углеродного скелета этой группы $\tau(\text{C6-C1-C2-C3})$, $\tau(\text{C1-C2-C3-C4})$, $\tau(\text{C2-C3-C4-C5})$ и $\tau(\text{C4-C5-C6-C7})$ соответственно равны -0.116° , -0.236° , 0.059° и 0.472° ; а также ароматические атомы водорода тоже лежат в этой

плоскости. Их торсионные углы $\tau(\text{C6-C1-C2-H})$, $\tau(\text{C1-C2-C3-H})$, $\tau(\text{C2-C3-C4-H})$, $\tau(\text{C3-C4-C5-H})$ и $\tau(\text{C4-C5-C6-H})$ соответственно равны -178.320° , 179.975° , -179.993° , -179.800° и 178.892° , которые свидетельствуют об ароматичности кольца.

Таблица 1.

Заряды на атомах, длина связей и валентные углы молекулы Фенибут

№	Атом	q, e	Длина связи	d, Å	Валентный угол	ϕ , град.
1	C1	-0.267	C1-C2	1.404	C1-C2-C3	120.709
2	C2	-0.228	C2-C3	1.398	C3-C4-C5	119.266
3	C3	-0.186	C3-C4	1.394	C5-C6-C1	120.708
4	C4	-0.188	C4-C5	1.397	C1-C7-C8	112.691
5	C5	-0.189	C5-C6	1.394	C8-C9-O10	126.538
6	C6	-0.203	C1-C7	1.538	C8-C9-O11	110.844
7	C7	-0.267	C7-C8	1.548	C7-C12-N13	120.920
8	C8	-0.469	C8-C9	1.511	C1-C2-H	120.630
9	C9	0.645	C9-O10	1.224	C2-C3-H	119.438
10	O10	-0.478	C7-C12	1.557	C5-C6-H	121.534
11	O11	-0.547	C12-N13	1.482	C1-C7-H	108.512
12	C12	-0.205	C2-H	1.082	C7-C8-H	108.124
13	N13	-0.651	C3-H	1.084	C9-O10-H	126.538
14	H2	0.192	C4-H	1.084	C7-C12-H	108.278
15	H3	0.178	C5-H	1.085	C12-N13-H	111.794

№	Атом	q, e	Длина связи	d, Å	Валентный угол	φ, град.
16	H4	0.178	C6-H	1.084		
17	H5	0.178	C7-H	1.100		
18	H6	0.226	C8-H	1.090		
19	H7	0.231	C8-H'	1.099		
20	H8	0.231	O11-H	0.999		
21	H8'	0.229	C12-H	1.106		
22	H11	0.362	C12-H'	1.094		
23	H12	0.163	N13-H	1.024		
24	H12'	0.214	N13-H'	1.023		
25	H13	0.270				
26	H13'	0.272				

Согласно табличным данным, атомы кислорода O10, O11, карбоксильной группы и атом азота N13 аминогруппы несут максимальные отрицательные

заряды равные -0.478e, -0.547e и -0.651e, соответственно.

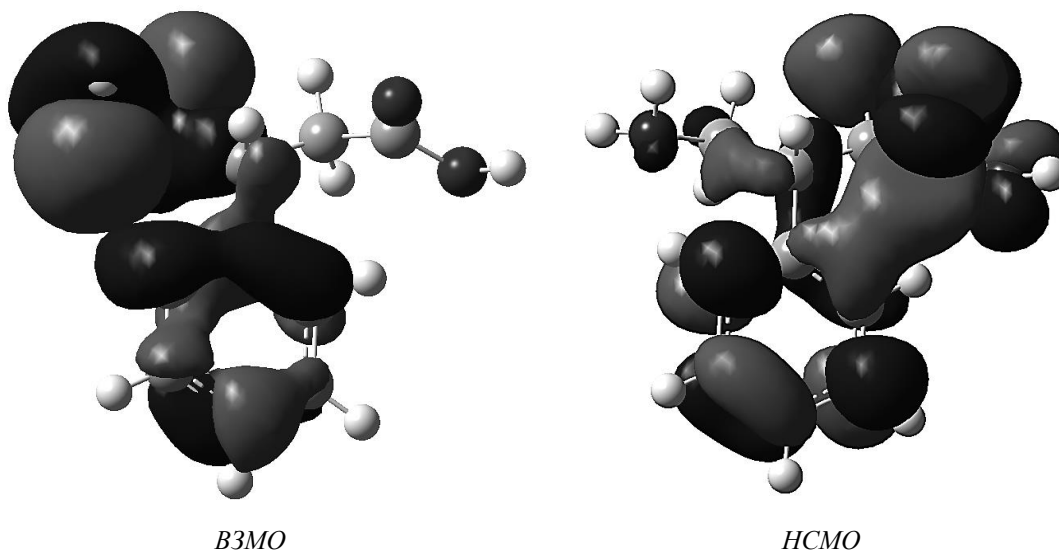


Рисунок 2. Граничные Орбитали (ГО) молекулы

Энергия ГО Фенибута составляет: $E_{ВЗМО} = -0,217\text{эВ}$, $E_{НСМО} = 0,004\text{эВ}$. Энергетическая щель между ГО равна $\Delta E_{ГО} = 0,221\text{эВ} < 1\text{эВ}$. В целом, распределение зарядов (см. таблицу) и вид ГО (Рис. 2.)

указывают на высокую реакционную способность реагентов в отношении к аминогруппе и карбоксильной группам, согласно зарядового и орбитального типа контроля реакций.

Список литературы:

1. Matthew I. Hardman, Juraj Sprung, Toby N. Weingarten.// Bosnian Journal of Basic Medical Sciences. — 2019. — Vol. 19, No. 2. — С. 125–129.
2. Аскарлов И.Р., Исаев Ю.Т., Махсумов А.Г., Киргизов Ш.М. Органическая химия. / Т.: изд-во Г. Гулям. - 2012. - 608 с.
3. M.J.F. Frisch and etc. / Gaussian 98. Revision A.5, Gaussian Inc. - Pittsburg (PA), 1998.
4. И.Р. Аскарлов, Ш.М.Киргизов, М.Х. Мамарахмонов, С.А. Алимбоев. Синтез и квантово-химическое изучение реакции ацетилферроцена с изомерами аминобензойной кислоты. / Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 1(67). Стр 42-44.
5. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, А.М. Джураев, Н.Д. Чувылкин, И.Р. Аскарлов. Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 1. Реакции арилирования с аминобензойными кислотами // Изв. АН. Сер. хим. – Москва, 2017. - №4. С. 721-723.
6. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, Н.Д. Чувылкин, И.Р. Аскарлов Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 2. Реакции арилирования с аминофенолами // Изв. АН. Сер. хим. – Москва, 2017. - №4. С. 724-726.