**Особенности протекания реакций фотоиндуцированного присоединения и деструкции 4-азидоанилина: квантовохимические расчеты**

***Карпушенкова В.С.,1 Яковец П.С.1***

*Студентка, 4 курс специалитета*

*1Белорусский государственный университет,*

*химический факультет, Минск, Республика Беларусь*

*E-mail:* *karpushenkova.v.s@gmail.com*

Фотоаффинное мечение (PAL) – метод исследования структур активных сайтов белков и макромолекулярных взаимодействий, основанный на ковалентном присоединении продуктов фотолиза к биомолекуле-мишени [1]. В случае арилазидов образуются нитрены и их ионы. Для дизайна таких молекул важно теоретически рассчитать энергии возможных процессов. Цель работы – расчет параметров основных и возбужденных состояний 4-азидоанилина для выявления оптимальных условий проведения реакций PAL. Материалы и методы – ПО Gaussian 09W. Метод – B3LYP, 6-31+g(d,p), CPCM, этанол. Рассчитаны геометрии и энергий состояний S0, S1, T1 для азидоанилина (AZAN1) и для некоторых предполагаемых продуктов фотолиза или фотоприсоединения к метанолу и пропину (рис.1). Энергия структуры нитрена (AZANcbn1) в S1 состоянии выше, чем для T1. Показано, что между нитреновым интермедиатом и метанолом термодинамически более выгодно формирование N-C, а не N-O связи (AZANaddMet11). Перегруппировка нитрена (AZANcbn1, состояние S1) данной структуры более выгодна в хиноновый интермедиат (AZANQ1, S0), чем в азепиновый (AZANint1, S0). Для нитрена AZANcbn1 энергетически выгоднее присоединение по нуклеофильному С-атому алкиновой группы, приводящее к линейному интермедиату AZANaddYN11 (рис. 1).



Рис. 1. Продукты [1] фотохимического превращения 4-азидоанилина и значения их энергий и дипольных моментов в S0, S1, T1 состояниях

*Благодарности. Работа проведена при поддержке грантов Министерства образования Республики Беларусь № г.р. 20220695, ГПНИ № г.р. 20210560, БГУ (Карпушенкова В.С.). Авторы благодарят научного руководителя к.х.н., доц. Фалетрова Я.В. и зав.лабораторией биохимии лекарсвенных препаратов НИИ ФХП БГУ член-корр., д.б.н., проф. Шкуматова В.М.*

**Литература**

1. Panov M. Early Events in Photochemistry of Aryl Azides Used as Photoaffinity Labeling Agents: diss. [Электронный ресурс] // Photochemical Sciences Ph.D. Dissertations. 2011. P. 50. URL: <https://scholarworks.bgsu.edu/photo_chem_diss/50> (дата обращения 03.09.21).