

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ХИРАЛЬНОГО МОДИФИКАТОРА НА ОСНОВЕ РАЗНОСТИ $E_{\text{Red/Ox}}$ ЕГО ЭНАНТИОМЕРОВ

Важным условием достижения наилучшего качества анализа энантиомерных препаратов с помощью энантиоселективных сенсоров, являются хиральные модификаторы. Строение модификатора имеет важное значение для обеспечения наилучшей селективности. В настоящее время выбор хирального модификатора происходит методом перебора, что занимает достаточно много времени. Нами предложен теоретический метод оценки качества хирального модификатора, используемого для создания энантиоселективных вольтамперометрических сенсоров [1-3]. Метод основан на вычислении разности окислительно-восстановительных потенциалов между комплексами энантиомеров:

$$\Delta E_{\text{Red/Ox}}(\text{R/S}) = E_{\text{Red/Ox}}(\text{R}_{\text{Analit}} * \text{R}_{\text{Mod}}) - E_{\text{Red/Ox}}(\text{S}_{\text{Analit}} * \text{R}_{\text{Mod}})$$

используя, ранее обоснованные полуэмпирические квантово-химические приближения, обладающие достаточной точностью [4, 5].

Оценка разности потенциалов была рассчитана на примере R и S энантиомеров Alprenolol, Clopidogrel, Cys, Glu, Hyp, Ile, Leu, Levomecetin, Met, Naproxen, Ofloxacin, Penicilamin, Propranolol, Trp и Tyr в приближении SM5.2/AM1 при взаимодействии с хиральными модификаторами Ala, Asp, Glu, Ile, Leu, Pro и Gln, взятыми в R конфигурации (табл1).

**Таблица 1 - Разница  $E_{\text{Red/Ox}}$  между комплексами энантиомеров  
(R)-аналит\*(R)-модификатор и (S)-аналит\*(R)-модификатор.**

Аналит	$\Delta E_{\text{Red/Ox}}(\text{R/S})$ , эВ						
	Модификатор						
	Ala	Asp	Glu	Ile	Leu	Pro	Gln
1	2	3	4	5	6	7	8
Alprenolol	0.14	0.21	0.49	0.32	0.35	0.08	0.09
Clopidogrel	0.25	0.29	0.21	0.12	0.22	0.23	0.10
Cys	0.00	0.08	0.07	0.13	0.05	0.25	0.21
Glu	0.05	0.06	0.04	0.00	0.03	0.00	0.20
Hyp	0.02	0.10	0.04	0.02	0.11	0.01	0.08
Ile	0.01	0.07	0.13	0.07	0.08	0.04	0.03
Leu	0.01	0.05	0.01	0.09	0.09	0.09	0.07
Levomecetin	0.05	0.09	0.07	0.30	0.22	0.25	0.13
Met	0.12	0.02	0.19	0.27	0.13	0.03	0.07

Продолжение таблицы

1	2	3	4	5	6	7	8
Naproxen	0.01	0.02	0.15	0.19	0.29	0.15	0.02
Ofloxacinum	0.32	0.12	0.10	0.24	0.04	0.21	0.04
Penicillamine	0.06	0.14	0.12	0.01	0.20	0.02	0.00
Propionalol	0.38	0.16	0.01	0.20	0.18	0.66	0.10
Trp	0.07	0.18	0.05	0.20	0.14	0.04	0.13
Tyr	0.02	0.09	0.18	0.01	0.12	0.12	0.13
<b>Ср.знач.</b>	<b>0.10</b>	<b>0.11</b>	<b>0.12</b>	<b>0.15</b>	<b>0.15</b>	<b>0.15</b>	<b>0.09</b>

Рассчитав потенциалы, заметно, что разности потенциалов зависят от структуры модификатора, а также превышают ошибку экспериментальных измерений. Что будет использовано для построения корреляционного уравнения, связывающего расчетную и экспериментальную разность потенциалов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры / В.Н. Майстренко, Г.А. Евтюгин, Р.А. Зильберг. – Уфа : Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с. – ISBN 978-5-7477-4754-8. – EDN SEWOBC.
2. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе хиральных материалов / В.Н. Майстренко, Р.А. Зильберг // Журнал аналитической химии. – 2020. – Т. 75. – № 12. – С. 1080-1096. – DOI 10.31857/S0044450220120105. – EDN ZJLBKT.
3. Enantioselective Voltammetric Sensors Based on Amino Acid Complexes of Cu(II), Co(III), and Zn(II) / R. A. Zil'berg, L. R. Zagitova, I. V. Vakulin [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2021. – Vol. 76. – No 12. – P. 1438-1448. – DOI 10.1134/S1061934821120145. – EDN FJIVJ.
4. Semi-empirical methods in RedOx potential calculations of substituted aromatic compounds: Parameterizations, solvation models, approximation by frontier molecular orbital energies / I. V. Vakulin, D. V. Bugaets, R. A. Zilberg, V. N. Maistrenko // Electrochimica Acta. – 2019. – Vol. 294. – P. 423-430. – DOI 10.1016/j.electacta.2018.09.126. – EDN GSRYRL.
5. Вакулин, И. В. Анализ точности расчета Red/Ox потенциалов замещенных фенолов, хинонов и анилинов полуэмпирическими методами AM1, RM1 и PM7 / И. В. Вакулин, Д. В. Бугаец, Р. А. Зильберг // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т. 52. – № 11. – С. 53-59. – EDN YSXHKN.