

МОЛЕКУЛЯРНАЯ АГРЕГАЦИЯ ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ В БИНАРНОЙ СИСТЕМЕ ВОДА-ДМФА

Клименко И.В.¹, Астахова Т.Ю.¹, Тимохина Е.Н.¹, Лобанов А.В.^{1,2,3}

¹ФГБУН Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва

²ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

³ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет», Москва
inna@deom.chph.ras.ru

При использовании тетрапиррольных макрогетероциклических соединений, в том числе фталоцианинов (ФЦ) и их металлокомплексов, в качестве фотосенсибилизаторов (ФС) в фотодинамической терапии (ФДТ) требуется их солюбилизация в водных средах. Однако фармацевтическое применение ФЦ осложняется их склонностью к агрегации в физиологических растворах, приводящей к снижению фотодинамической активности. При разработке способов контроля над агрегационным состоянием ФЦ необходимо понимание механизмов межхромноформного взаимодействия, так как эффективное функционирование ФЦ как ФС при ФДТ возможно только в мономерной (изолированной) форме.

Используя теорию функционала плотности (метод DFT) с помощью пакета программ для квантовых расчетов ORCA 4.2.1, рассчитаны спектры поглощения и флуоресценции мономерной молекулы, а так же H- и J-агрегатов AlClФЦ в среде ДМФА и ДМФА-вода. Расчеты показали практически полное совпадение с экспериментом. Установлено, что в смеси ДМФА - вода молекула AlClФЦ легко гидратируется с образованием координационной связи между атомом Al молекулы AlClФЦ и атомом O молекулы воды. Показано, что гидратированные молекулы AlClФЦ могут легко образовывать димеры различной ориентации. Наиболее энергетически выгоден димер «спина к спине», стабилизированный четырьмя связями между двумя молекулами AlClФЦ и двумя молекулами воды. В отсутствие воды в среде ДМФА комплекс AlClФЦ, имеющий дополнительный хлоридный экстралиганд, удается стабилизировать в изолированном мономерном состоянии.

Исследование выполнено в рамках Госзадания ИБХФ РАН (№ гос. регистрации 01201253304) и Программы фундаментальных научных исследований РФ (Госзадание FFZE-2022-0009, ФИЦ ХФ РАН). Расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН.