



ХИМИЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ *IN SILICO*

Бурное развитие компьютерной техники и теоретических подходов к моделированию молекулярных систем за последние 20–25 лет привело к определённой революции в химии, связанной с ролью теоретических расчётов в повседневной работе химиков-экспериментаторов. Это обусловлено тем, что с помощью расчётных методов стало возможным получать информацию о структуре и свойствах молекул и их ансамблей с экспериментальной точностью. Всё это привело к возникновению отдельной области химии – компьютерной химии, которая занимается получением данных о молекулярных системах с помощью подходящих теоретических методов. Иначе говоря, компьютерная химия это химия *in silico*, т. е. "химия в компьютере". Она ни в коей мере не заменяет и не отменяет экспериментальные исследования, а в значительной степени их дополняет, давая в руки экспериментатору мощнейший инструмент для проникновения вглубь химических веществ, процессов и явлений. Все это в полной мере касается всех областей химии, в том числе и химии гетероциклических соединений.

Этот специальный номер журнала посвящён применению методов компьютерной химии для исследования гетероциклических соединений. Статьи отражают широкий спектр возможностей использования теоретических методов: от чисто теоретических исследований строения и энергетических характеристик изолированных молекул и молекулярных комплексов (как,

например, в статьях М. Ниерадки, Р. И. Зубатюка, Б. Ф. Минаева) до применения расчётов для интерпретации экспериментальных данных.

Основой успеха методов компьютерной химии является воспроизведение молекулярной структуры соединений с экспериментальной точностью. Это означает, что в расчёте достаточно полно и точно учитываются все внутримолекулярные взаимодействия, существующие в молекулах.

В свою очередь, надёжность расчёта молекулярной структуры открывает путь к корректному моделированию различных физико-химических, в первую очередь спектральных, свойств молекул. Это, в частности, касается колебательных спектров (ИК и КР), спектров ЯМР, электронных спектров поглощения. Однако, в отличие от экспериментальных данных, расчёты позволяют точно соотнести каждую полосу в спектре со свойствами отдельных атомов, связей или фрагментов молекулы, как это показано, например, в представленных в этом номере статьях А. Д. Рошала и Б. С. Лукьянова. В результате интерпретация экспериментальных спектров значительно упрощается. Более того, совпадение экспериментально измеренных и теоретически рассчитанных спектров может служить достаточно надёжным доказательством строения новых полученных соединений, примером чего является работа С. В. Половковича.

Другой важной областью применения компьютерных методов в химии гетероциклических соединений является оценка энергетики молекул и изучение механизмов реакций. Высокая надёжность получаемых расчётных данных позволяет рассматривать механизмы химических реакций не в виде нарисованных на бумаге предположительных схем, а как реальный процесс взаимодействия между молекулами, где можно проследить за изменением геометрии системы и оценить энергетические характеристики на каждой стадии процесса, а также получить данные об относительной стабильности возможных продуктов реакции или изомеров. Хорошими иллюстрациями использования теоретических методов для изучения реакционной способности и механизмов реакций являются статьи Л. Святенко, А. Поатера, Е. Блажейовски.

Одним из наиболее активно развивающихся направлений современной компьютерной химии является изучение структуры и свойств ассоциатов молекул, связанных нековалентными взаимодействиями. Особенно актуальным является это направление для гетероциклических соединений, многие из которых обладают достаточно сильной биологической активностью. Поскольку такие свойства веществ предоставляют возможности их нековалентного связывания с биологическими молекулами, то важным является как изучение характеристик межмолекулярных взаимодействий с участием гетероциклов, так и прогнозирование фармакологических свойств соединений на основе поиска соотношений структура–свойство и структура–активность. Возможности такого прогнозирования хорошо показаны в обзорной статье В. В. Поройкова.



Редактор номера
д. х. н. О. В. Шишкин,
НТК "Институт монокристаллов"
НАН Украины