

## **Исследование медиборолы на основании теории функционала плотности**

© Поleshch Олег Хемович<sup>1+</sup> и Краснов Ефим Авраамович<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Кафедра естественно-научного образования. Юргинский технологический институт  
Томского политехнического университета. Ул. Ленинградская, 26. г. Юрга, 652055. Россия.  
Тел.: (3822) 59-14-54. E-mail: [poleshch@tspi.edu.ru](mailto:poleshch@tspi.edu.ru)

<sup>2</sup> Кафедра фармацевтической химии. Сибирский государственный медицинский университет.  
Ул. Московский тракт, 2. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 42-64-41. E-mail: [krasnov.37@mail.ru](mailto:krasnov.37@mail.ru)

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** теория функционала плотности,  $B3LYP/6-31G(d)$ , медиоборол, натуральные орбитали связи.

### **Аннотация**

Проведены квантово-химические расчеты медиборолы в газовой фазе и в растворе методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора 6-31G(d) в программном пакете GAUSSIAN'03 и TZ2P+ в программе Амстердамский функционал плотности. Показана структурная возможность реакции медиборолы с хлоридом железа, проведен анализ орбитальных взаимодействий. Показана термодинамическая невозможность протекания этой реакции.