

**К ОБОСНОВАНИЮ СРАВНИТЕЛЬНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ  
АКТИВНОСТИ ДВУХ СОЕДИНЕНИЙ С ГРУППОЙ PO(OH)<sub>2</sub>:  
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ NBO- И AIM-АНАЛИЗ**

**А. Н. Панкратов<sup>1</sup>, В. О. Серяпин<sup>1</sup>, О. М. Цивилева<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов*

<sup>2</sup>*Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН, Саратов*

Глифосат (глицилфосфовая кислота) - активная основа известного препарата гербицидного действия, ингибирующая 5-енолпирувиллицимат-3-фосфат синтазу (EPSPS). EPSPS - ключевой фермент такого биосинтетического пути, который необходим для продукции ароматических аминокислот. Для реализации цели сопротивления токсическому действию глифосата некоторые бактерии и растения добиваются расщепления одной из двух связей C-N в молекуле глифосата с образованием производного метилфосфоновой кислоты. Биологической активности глифосата, помимо токсичности (по сравнению с метилфосфоновой кислотой), способствуют и другие факторы, среди которых предположительно велико значение прочности связи углерод-фосфор в молекулах двух упомянутых соединений. Для обоснования сравнительной прочности связи C-P в метилфосфоновой кислоте и глифосате методом теории функционала плотности DFT на уровне теории B3LYP/6-311G++(3df,3pd) проведено сравнительное квантовохимическое исследование электронного строения молекул CH<sub>3</sub>PO(OH)<sub>2</sub> (**I**) и HOOCCH<sub>2</sub>NHCH<sub>2</sub>PO(OH)<sub>2</sub> (**II**). Осуществлена оценка QSAR-свойств по атомно-связево-аддитивным схемам. Анализ натурального порядка связей и связевых орбиталей, топологических свойств электронной плотности, дипольного момента дал возможность прогнозировать большую склонность глифосата **II** подвергаться ферментативной деструкции с разрывом связи C-P по сравнению с метилфосфоновой кислотой **I**. Возможно, сравнительная реакционная способность двух фосфоросоединений в ферментативной реакции отчасти связана с большей гидрофильностью вещества **II**, способствующей встраиванию молекулы в активный центр фермента, а также более высокой поляризуемостью молекулы **II**, позволяющей ей образовывать с реагентом или активным центром фермента ван-дер-ваальсов комплекс, предшествующий химическому превращению.