



## СТРУКТУРА *n*-ХЛОРБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА И РАСЧЕТА МЕТОДОМ DFT, А ТАКЖЕ РАСЧЕТ *in silico* МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА КИСЛОТЫ С ФЕРМЕНТОМ ТАНКИРАЗА I<sup>1</sup>

© 2020 Doaa S El Sayed\*, #, Sabine Foro\*\*

\*Chemistry Department, Faculty of Science, Alexandria University, P.O. box 426, Ibrahimia, Alexandria, 21321 Egypt

\*\*FB Material Wissenschaft, FG Strukturforschung, Technische Universitaet Darmstadt, Alarich-Weiss-Str. 2, Darmstadt, D-64287 Germany

Поступила в редакцию 16.01.2020 г.

После доработки 27.01.2020 г.

Принята к публикации 31.01.2020 г.

*n*-Хлорбензойная кислота несет атом хлора в положении 4, где он может влиять на координацию молекулы и контролировать определенные биологические параметры, он может ингибировать действие специфического фермента в организмах. Данные рентгеноструктурного анализа дают количественную информацию о ковалентных и нековалентных взаимодействиях в 3D-формате. Перекристаллизацию *n*-хлорбензойной кислоты проводили для удаления возможных примесей и получения ее в чистом кристаллическом виде. С помощью рентгеноструктурного анализа изучены строение и геометрические параметры молекулы. Экспериментальные данные сравнивались с расчетными для оптимизированной структуры, полученной методом вычислительного квантово-механического моделирования – теории функционала плотности (DFT). Оказалось, что структура *n*-хлорбензойной кислоты представляет собой димер, стабилизированный межмолекулярными водородными связями. Изучены инфракрасные спектры и проведен термический анализ этого соединения. Структурные геометрические параметры оценены с помощью метода DFT. Молекулярный докинг *in silico* тестируемого лиганда в ферменте танкираза I показывает наличие ряда водородных связей, взаимодействий хлора и ароматического кольца, эти рассчитанные взаимодействия могут ингибировать аминокислотные активные сайты фермента танкираза I. И поэтому такое ингибирование может препятствовать некоторым видам биологической активности, и особенно – противоопухолевому эффекту.

*Ключевые слова:* *n*-хлорбензойная кислота, кристаллография, инфракрасный, метод DFT, *in silico*, молекулярный докинг

DOI: 10.31857/S0132342320040259

<sup>1</sup> Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

# Автор для связи: (эл. почта: doaasaied75@yahoo.com).