

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194/547.781/718

DOI: 10.17223/00213411/64/6/157

В.А. КАТАЕВ^{2,3}, В.В. ЛАЗАРЕВ¹, С.А. МЕЩЕРЯКОВА²АНАЛИЗ СПЕКТРА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ
6-МЕТИЛ-3-(ТИЕТАН-3-ИЛ)ПИРИМИДИН-2,4(1H, 3H)-ДИОНА

Спектр комбинационного рассеяния и колебательный инфракрасный спектр 6-метил-3-(тиетан-3-ил)пиримидин-2,4(1H, 3H)-диона зарегистрированы в диапазонах 4000–70 и 4000–400 см⁻¹ соответственно. Представлены результаты DFT-расчётов оптимальной структуры мономера и димера и колебательных спектров. Теоретический анализ спектра и соотнесение фундаментальных колебаний основаны на предположении, что молекулы в кристалле формируют комплексы (димеры) с образованием водородной связи. Рассчитанные частоты колебательных спектров хорошо согласуются с экспериментальным спектром.

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния света, инфракрасная спектроскопия, 6-метил-3-(тиетан-3-ил)пиримидин-2,4(1H, 3H)-дион, водородная связь, димеры.

Введение

Благодаря широкому спектру фармакологической активности ряд производных урацила широко применяется в медицинской практике для лечения онкологических заболеваний (фторурацил, тегафур), в антиретровирусной терапии иммунодефицита человека (зидовудин, фосфазид), в качестве иммуностимулирующих средств (пентоксил) и анаболических препаратов (оротовая кислота, магния оротат) [1]. Особый интерес представляют производные урацила, содержащие тиетанильный цикл, проявляющие выраженную гипотензивную [2], антиоксидантную [3], противомикробную и противогрибковую [4] активность. Большинство ведущих фармацевтических производителей и испытательных лабораторий благодаря эффективности и экспрессности метода спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) успешно применяют его для контроля технологического процесса производства фармацевтических препаратов и для идентификации контрафактной лекарственной продукции [5, 6].

Цель данной работы – изучение спектров КР новых потенциально биологически активных тиетанилпроизводных урацила и возможности применения метода спектроскопии КР в анализе лекарственных препаратов.

Экспериментальная часть

6-Метил-3-(тиетан-3-ил)пиримидин-2,4(1H, 3H)-дион, далее (МТП) – кристаллическое вещество, полученное по методике [7]. Тиетанилурацил представляет собой белое с желтоватым оттенком кристаллическое вещество с характерной температурой плавления, нерастворимое в воде, спирте, растворимое в диметилформамиде, диметилсульфоксиде и растворах щелочей. Спектры КР получены на фурье-спектрометре FT-Raman NXR 9650 с охлаждаемым жидким азотом Ge-детектором в области 4000–70 см⁻¹ с разрешением 2 см⁻¹. В качестве источника возбуждения использовался лазер Nd:YVO₄ с длиной волны 1064 нм и мощностью до 1.5 Вт. Погрешность в определении положения в спектре полос КР составляет 0.4 см⁻¹. Измерения инфракрасных (ИК) спектров проводилось на ИК-фурье-спектрометре Nicolet iS10 с разрешением 4 см⁻¹ в области 4000–400 см⁻¹. Обработка фурье-спектров осуществлялась с помощью программного комплекса OMNIC [8], позволяющего проводить компьютерную обработку сложных спектров (разложение на отдельные полосы, детальный анализ, фильтрация, сглаживание). Формы контуров составляющих аппроксимировались симметричными кривыми вида функций Фойгта.

Оптимизация геометрических параметров молекулы МТП и решение колебательной задачи выполнялись в приближении гибридного функционала плотности DFT/B3LYP [9] с базисным набором 6–311++G(d, p), учитывающим диффузионные и поляризационные эффекты атомных орбиталей. Для визуализации полученных результатов применялась программа ChemCraft [10]. Соответствие найденных структур минимумам на поверхности потенциальной энергии устанавливали по отсутствию отрицательных элементов в диагонализированной матрице Гессе. Рассчитанные частоты колебаний использовали без масштабирующих коэффициентов.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>