

## ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539:535

DOI: 10.17223/00213411/68/4/6

**Природа электронно-возбужденных состояний  
и спектрально-люминесцентные свойства сульфаниламида в воде\***Н.П. Безлепкина<sup>1,2</sup>, О.К. Базыль<sup>1</sup>, О.Н. Чайковская<sup>1,2</sup>, Г.В. Майер<sup>1</sup><sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия<sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

Представлено экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров поглощения и флуоресценции сульфаниламида в воде. Квантово-химическая интерпретация спектров выполнена полуэмпирическим методом ЧПДП. Методом МЭСП определены протонно-акцепторные центры сульфаниламида, что позволило обоснованно построить геометрию комплексов с Н-связями молекулы сульфаниламида с водой. Установлено, что главными протонно-акцепторными центрами сульфаниламида являются атомы кислорода  $\text{SO}_2\text{NH}_2$  группы. Результаты расчетов спектров поглощения удовлетворительно согласуются с экспериментальными спектрами. Квантовый выход флуоресценции сульфаниламида в воде равен 0.49. Наибольшее соответствие экспериментальному спектру поглощения получено при рассмотрении комплекса нейтральной формы сульфаниламида с водой состава 1:2. Наибольшее соответствие экспериментальному спектру флуоресценции было получено при расчете спектральных свойств дипротонированной формы сульфаниламида.

**Ключевые слова:** сульфаниламид, квантово-химический расчет, поглощение, флуоресценция, электронно-возбужденные состояния.

**Введение**

Сульфаниламид (сульфонамид, 4-аминобензолсульфонамид) является основным представителем сульфаниламидных антимикробных препаратов и представляет собой основную структурно-функциональную единицу всего класса антимикробных сульфаниламидов. Сульфаниламиды являются антимикробными препаратами с широким спектром действия. В основе ингибирующего эффекта лежит сходство структур сульфонамида и *para*-аминобензойной кислоты. Для антибактериальной активности сульфаниламидов необходима свободная ароматическая  $\text{NH}_2$ -группа в *para*-положении относительно сульфаниламидной группы [1]. Кроме того, сульфаниламидная группа должна быть непосредственно присоединена к бензольному кольцу. Замена бензольного кольца другой циклической системой также приводит к снижению или полной потере активности [2]. В настоящее время сульфаниламиды по-прежнему являются препаратами первого выбора для лечения некоторых состояний и заболеваний [3]. Чаще всего используются для лечения инфекций мочевыводящих путей, профилактики инфекций у пациентов с ожогами, в терапии кишечных инфекций, язвенного колита и энтерита [4–6], могут применяться в виде растворов или мазей при терапии конъюнктивита, а также в качестве дополнительного препарата при лечении трахомы.

Скорость и способ выведения сульфаниламидов зависят от применяемого соединения, введенной дозы, вида животных и пути введения [7]. Некоторые из сульфаниламидных препаратов могут выводиться из организма в неизмененном виде в количестве 50%, а также в виде ацетил- и глюкуроновых конъюгатов [8] и до ~90% выводятся из организма животных в неизмененном виде [9]. Применение сульфаниламидов и других антимикробных препаратов в терапии приводит к их постоянному попаданию в окружающую среду, распространению и поддержанию бактериальной резистентности. Результаты показали, что сульфаниламиды повсеместно распространены в водной среде в концентрациях от нг/л до мкг/л [8]. По этой причине удаление антимикробных препаратов из окружающей среды представляет серьезную проблему с точки зрения защиты окружающей среды. На основании вышесказанного необходимо усилить исследования для определения содержания антибиотиков в водных системах [10].

\* Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания (№ FSWM-2025-0007).