

Н-КОМПЛЕКСЫ ИМИДАЗОЛА С ПРОТОНОАКЦЕПТОРНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ ПО ДАННЫМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Н.У. Муллоев¹, Н.А. Маджидов¹, Н.Л. Лаврик²

¹Таджикский национальный университет, г. Душанбе, Таджикистан

²Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Методами ИК-спектроскопии и квантовой химии изучено образование Н-комплексов молекулы имидазола с протоноакцепторными молекулами (ацетон, ацетонитрил, диметилформамид (ДМФА) и диметилсульфоксид (ДМСО)) в неполярном растворителе CCl_4 . Показано, что добавление протоноакцепторных молекул к имидазолу приводит к низкочастотному смещению ИК-полосы валентного колебания группы N–H имидазола как экспериментально наблюдаемому, так и рассчитанному квантово-химически. На основании полученных данных сделано заключение об образовании Н-связи между N–H-группой имидазола и группами CN, CO или SO молекул акцепторов протона. С помощью корреляционного соотношения между сдвигом валентного колебания N–H молекулы имидазола в ассоциированном состоянии относительно свободного проведена оценка энтальпий образования Н-комплексов имидазола с протоноакцепторными молекулами, которые составили 11.9, 12.3, 17.5 и 20.8 кДж/моль для комплексов {имидазол – ацетонитрил}, {имидазол – ацетон}, {имидазол – ДМФА} и {имидазол – ДМСО} соответственно. Установлена корреляция между сдвигом полосы N–H-колебания и дипольным моментом молекулы акцептора протона.

Ключевые слова: Н-связь, ИК-спектроскопия, квантово-химический расчет, имидазол, протоноакцепторные молекулы, энтальпия образования Н-связи.

Введение

Образование комплексов различного состава и строения посредством водородных связей (Н-комплексов) определяет многие физико-химические свойства веществ. Наличие межмолекулярной водородной связи приводит к перераспределению электронной плотности в образующих ее молекулах, что в результате приводит к изменению свойств вещества в целом. Несмотря на то, что водородные связи не являются ковалентными, они влияют на скорость и огромное разнообразие биохимических процессов. Это, прежде всего, связано с большим разнообразием межмолекулярных взаимодействий, совокупность которых становится определяющим фактором в химии биообъектов, поскольку в процессах специфического межмолекулярного взаимодействия способность молекул образовывать водородные связи является мерой их реакционной способности и активности [1, 2]. Отсюда и важная роль именно водородной связи во многих биологических и химических процессах [3, 4].

Среди веществ, способных к образованию Н-связей, особое место занимают гетероциклические соединения, которые имеют широкое биологическое и промышленное применение [5, 6]. Присутствие гетероатома в кольце гетероциклических соединений определяет многие особенности межмолекулярного взаимодействия этих соединений. Отличительной особенностью гетероциклических соединений является их способность проявлять как протонодонорные, так и протоноакцепторные способности. Благодаря этому свойству гетероциклические соединения, связываясь водородной связью с молекулами, имеющими протоноакцепторные или протонодонорные свойства, могут образовывать с ними донорно-акцепторные комплексы, «выступая в роли» либо донора, либо акцептора протона.

Среди азотосодержащих пятичленных гетероциклов особое место занимают производные имидазола [7–12], которые обладают высокой биологической и фармакологической активностью и широко применяются при лечении ряда заболеваний. Имидазол – это органическая молекула гетероциклического ряда, которая представляет собой 5-членное плоское кольцо (рис. 1).

Имидазол обладает лечебными противораковыми, антикоагулянтными, противовоспалительными, антибактериальными, противогрибковыми, противовирусными, противотуберкулезными, противодиабетическими и противомаларийными свойствами [8–14]. В связи с этим поиск новых перспективных лекарственных и пестицидных препаратов на основе производных этого

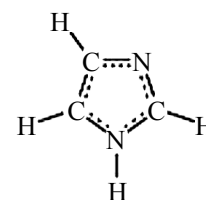


Рис. 1. Структура молекулы имидазола

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>