

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований 13-07-97001-р_поволжье_a, 14-07-31135-мол_a, 14-07-00339-А.

1. D. Vazquez-Molini, M. Gonzalez-Montez, A. Alvarez, E. Bernabeu, *Opt. Eng.*, **49**, №12, 123001, (2010).
2. S. Li, F. Chen, K. Wang, *Applied Optics*, **51**, №36 8557-8562, (2012).

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
***N'*-(АДАМАНТАН-2-ИЛИДЕН) БЕНЗОГИДРАЗИДА**
Гапоненко С.В., Глинистый А.В.*,
Шабуния-Клячковская Е.В., Шундалов М.Б.*

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь
*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Измерены колебательные КР и ИК спектры *N'*-(адамантан-2-илиден) бензогидразида (НА-23), потенциального антибактериального агента. На основе квантово-химических вычислений определена структура НА-23 для конденсированной фазы, а также осуществлена интерпретация его колебательных спектров.

Производные адамантана широко используются в медицинской практике благодаря их терапевтической активности. В настоящее время запатентовано не менее 50 лекарственных препаратов, которые содержат в своей структуре адамантоловую группу¹. Рассматриваемое соединение *N'*-(адамантан-2-илиден) бензогидразид (Рис. 1), ($C_{17}H_{20}N_2O$, или НА-23) включает в свой состав бензоиловую и адамантоловую функциональные группы² и рассматривается как потенциальный антибактериальный агент.

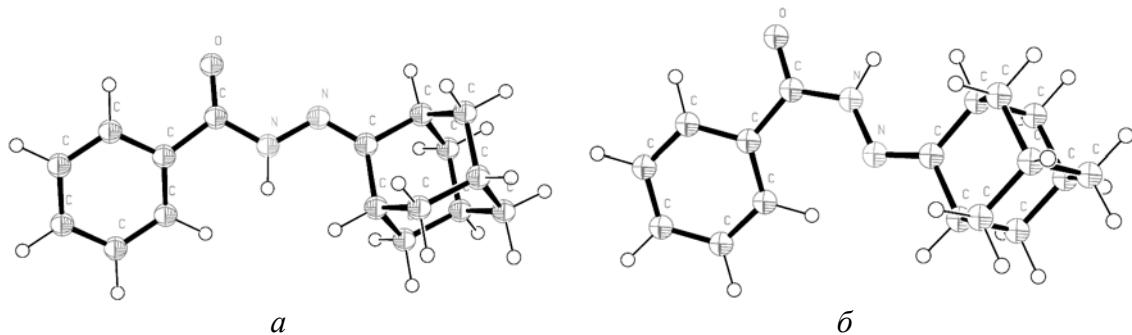


Рис. 1. Равновесные структуры транс- (a) и цис- (b) конформеров НА-23

В целях точного определения структуры и физико-химических характеристик НА-23 измерены его колебательные ИК и КР спектры для кристаллических образцов. Спектры КР (Рис. 2, a) регистрировались в диапазоне $3500\text{--}200\text{ cm}^{-1}$. Возбуждение проводилось второй гармоникой (532 нм) Nd:YAG лазера. ИК спектры поглощения (Рис. 2, б) регистрировались в диапазоне $3500\text{--}600\text{ cm}^{-1}$ с помощью FTIR спектрометра Nexus, работающего в режиме отражения.

Для интерпретации ИК и КР спектров выполнены квантово-химические *ab initio* расчёты геометрического строения, силовых полей, собственных частот колебаний в гармоническом приближении и интенсивностей в колебательных спектрах НА-23, а также некоторых других соединений, включающих соответствующие функциональные группы: адамантана, бензогидразида и др. Расчёты выполнялись в приближении B3LYP/cc-pVDZ.

В качестве равновесных структур рассматривались две конфигурации: для транс- и цис-положений C=O и N–N связей (Рис. 1, a и б). Рентгеноструктурные исследования для

криSTALLической фазы² предсказывают существование транс-конформера. В соответствии с данными расчётов для изолированных молекул (модель газовой фазы) более устойчивым оказывается цис-конформер: его энергия на 9.2 кДж/моль ниже транс-конформера. Рассчитанные значения геометрических параметров для транс-конформера НА-23 весьма успешно (отличия не превышают 2%) согласуются с экспериментальными значениями².

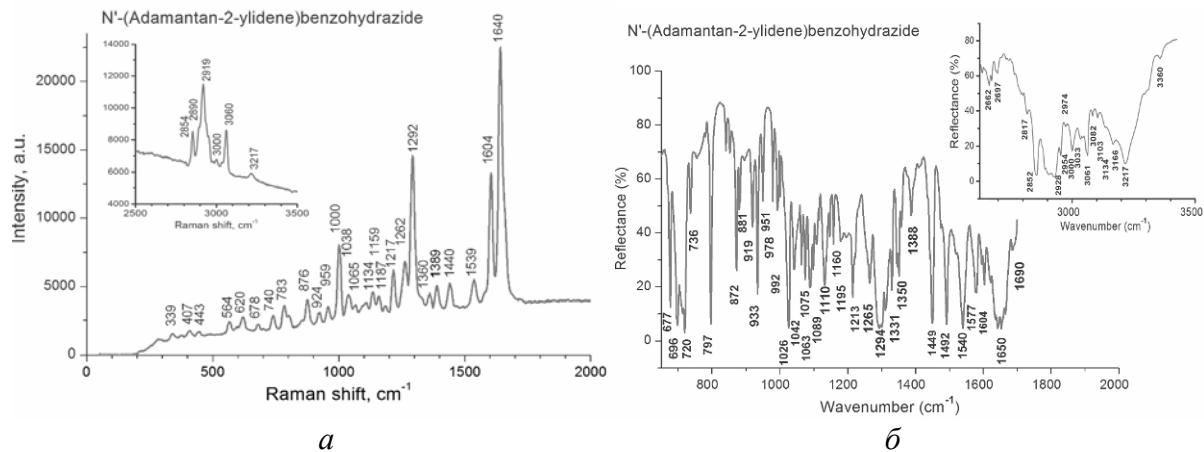


Рис. 2. Колебательные КР (*а*) и ИК (*б*) спектры НА-23

Таким образом, предполагается, что в полимерных (криSTALLических) структурах «открытая» транс-конфигурация оказывается более выгодной для формирования цепочки молекул, где каждая из них связана с двумя (или более) соседями посредством водородных связей. Для концентрированных растворов более выгодной предполагается «закрытая» димерная форма, состоящая из двух цис-конформеров, в которой С=О и N—H связи соединены попарно.

На основе расчёта определены характеристические частоты колебаний адамантиловой и фенильной групп, а также молекулярного «острова», который включает в себя фрагменты бензоиловой группы (С=О) и гидразида (—N(H)—N=). Установлено, что частоты и формы колебаний «острова» наиболее чувствительны к форме молекулы (транс-, цис- или димер цис-конформеров). В результате этого установлено, что экспериментальные колебательные спектры НА-23 адекватно интерпретируются на основе модели транс-конформера, что является спектроскопическим подтверждением строения НА-23 в криSTALLическом состоянии.

1. G. Lamoureux, G. Artavia, *Curr. Med. Chem.*, **17**, 2967–2978, (2010).
2. M.S. Almutairi, A.A. El-Emam, N.R. El-Brolosy, M. Said-Abdelbaky, S. García-Granda, *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep.*, **68**, o2247–o2248, (2012).