

групп, которые участвуют в образовании внутримолекулярных водородных связей как типа O–H...O, так и O–H...O=C типа.

Специфические особенности ИК Фурье-спектров бензальдегидов полезны для оценки противовирусной эффективности соединений и при синтезе новых препаратов с нужными фармакологическими свойствами.

Литература

1. Шадыро О.И., Бринкевич С.Д., Самович С.Н., Е.И. Бореко, О.В. Савинова, Н.И. Павлова. Ингибиторы размножения вируса герпеса в культуре клеток. // Заявка на патент РБ. –№ а20110727. –2011 г.
2. Толсторожев Г.Б., Скорняков И.В., Бельков М.В., Шадыро О.И., Бринкевич С.Д., Самович С.Н. Инфракрасные спектры бензальдегида и его производных в разных агрегатных состояниях. // Оптика и спектроскопия. –2012. –Т. 113. –№ 1. –С. 1-5

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИМОЛЕКУЛ АМИНОФЕНОЛОВ

**Толсторожев Г.Б.¹, Скорняков И.В.¹, Бельков М.В.¹,
Шадыро О.И.², Полозов Г.И.², Сорокин В.Л.², Ксендзова Г.А.²**

¹ *Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

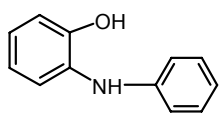
² *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

Актуальность исследований аминифенолов (АФ) физическими и химическими методами обусловлена биологической активностью этих соединений [1]. Детальный анализ спектроскопических свойств АФ позволяет получать информацию о фармакологической эффективности биомолекул, устанавливать взаимосвязи «химическая структура – спектроскопические свойства – фармакологическая функция» [2,3].

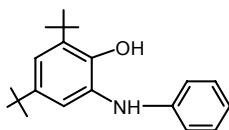
В данной работе приведены экспериментальные данные по исследованию ИК Фурье-спектров девяти близких по строению и в тоже время разных по биологическим свойствам производных АФ. Выясняются спектроскопические признаки и конкретная роль разных типов внутримолекулярных связей (ВВС) в формировании противовирусной активности АФ.

ИК спектры 10^{-3} М растворов производных АФ в CCl_4 регистрировались на ИК Фурье-спектрометре NEXUS при спектральном разрешении 2 см^{-1} с усреднением 256 сканирований.

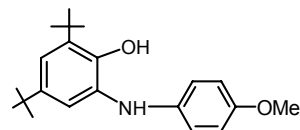
При исследовании активности против вируса герпеса объектами исследования были фенил- замещенные соединения АФ I – III.



I



II

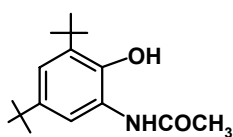


III

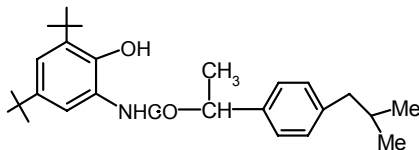
В ИК спектре *неактивного* соединения АФ I наблюдаются полосы поглощения (ПП) колебаний свободных ОН-групп с $\nu_{\max} = 3613 \text{ см}^{-1}$ и связанных NH-групп с $\nu_{\max} = 3470 \text{ см}^{-1}$. В спектре *неактивного* АФ II имеется ПП свободных колебаний с $\nu_{\max} = 3424 \text{ см}^{-1}$. В спектре АФ III, *активного* против вируса герпеса, наблюдается только ПП связанных колебаний О–Н с $\nu_{\max} = 3411 \text{ см}^{-1}$.

Отсутствие поглощения в области свободных колебаний О–Н свидетельствует о том, что *при проявлении активности* против вируса герпеса в молекулах АФ задействованы ВВС только одного типа О–Н...N [2,3].

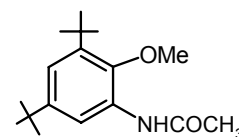
В карбонил- содержащих аминофенолах АФ IV – VI создаются возможности образования в молекулах ВВС других типов и проявления антивирусной активности против гриппа А.



IV



V



VI

Из анализа ИК спектров следует, что для соединения АФ IV, *активного* против гриппа А, характерно наличие в ИК спектре широкой и интенсивной полосы поглощения связанных колебаний О–Н с $\nu_{\max} = 3068 \text{ см}^{-1}$. Для колебаний N–H наблюдается полоса с $\nu_{\max} = 3430 \text{ см}^{-1}$ (область свободных колебаний NH-групп). Отсутствие в спектре АФ IV полосы колебаний связанных NH-групп обусловлено тем, что во взаимодействиях молекул активную роль играет атом водорода гидроксила с образованием ВВС типа О–Н...О=C [2].

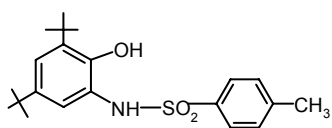
В ИК спектре *неактивного* соединения АФ V для связанных колебаний О–Н зарегистрирована ПП с $\nu_{\max} = 3052 \text{ см}^{-1}$, а для связанных колебаний N–H наблюдаются ПП с $\nu_{\max} = 3396 \text{ см}^{-1}$. Это обусловлено образованием в молекуле двойной ВВС хелатного типа О–Н...О...Н–N с участием атома кислорода группы С=О [3].

В структуре *неактивного* соединения АФ VI, в бензольном кольце нет гидроксильных групп. Как следствие метилирования, ПП колебаний

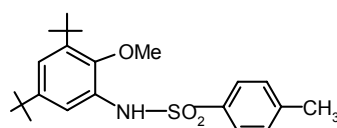
O–H с $\nu_{\max} = 3068 \text{ см}^{-1}$ в ИК спектре отсутствует, и наблюдаются только ПП колебаний свободных с $\nu_{\max} = 3432 \text{ см}^{-1}$ и связанных NH-групп с $\nu_{\max} = 3391 \text{ см}^{-1}$. Присутствие в ИК спектре ПП колебаний связанных NH-групп с $\nu_{\max} = 3391 \text{ см}^{-1}$ свидетельствует об образовании в молекулах *неактивного* соединения АФ VI ВВС типа N–H...O=C.

Таким образом, для производных АФ с карбонильной группой главным признаком высокой антивирусной активности против гриппа А является преобладание в молекулах ВВС типа O–H...O=C.

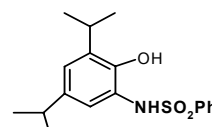
При наличии в молекулах группы SO₂, соединения АФ VII – IX, открываются возможности воздействия АФ на ВИЧ-инфекцию.



VII



VIII



IX

В ИК спектре анти-ВИЧ *активного* соединения АФ VII присутствуют ПП свободных и связанных колебаний O–H и N–H с $\nu_{\max} = 3637, 3515, 3370$ и 3248 см^{-1} . В спектре *неактивного* соединения АФ VIII наблюдается одна ПП свободных колебаний N–H с $\nu_{\max} = 3509 \text{ см}^{-1}$.

В спектре анти-ВИЧ *активного* соединения АФ IX зарегистрированы ПП свободных колебаний O–H и N–H с $\nu_{\max} = 3614$ и 3527 см^{-1} , а также полосы связанных колебаний O–H с $\nu_{\max} = 3481, 3252 \text{ см}^{-1}$ и колебаний N–H с $\nu_{\max} = 3361 \text{ см}^{-1}$. Близость частот колебаний ассоциированных OH- и NH-групп в ИК спектре АФ VII к частотам связанных колебаний O–H и N–H в ИК спектре АФ IX позволяет предположить, что в анти-ВИЧ активных соединениях группы OH и NH участвуют в образовании ВВС типов O–H...N, O–H...O=S=O и N–H...O=S=O [2].

Заключение. Проявление высокой антивирусной активности аминифенолов обусловлено возникновением внутримолекулярных водородных связей.

Для фенил- замещенных соединений, активных против вируса герпеса, характерно образование в молекулах ВВС типа O–H...N.

При наличии в молекулах аминифенолов группы C=O могут образоваться как O–H...O=C, так и N–H...O=C внутримолекулярные водородные связи. Признаком высокой активности против вируса гриппа А является преобладание в молекулах ВВС типа O–H...O=C. Для SO₂ производных аминифенолов, проявляющих антивирусную активность в отношении ВИЧ-инфекции, характерно проявление трех типов ВВС с участием групп OH, NH и SO₂.

Литература

1. Shadyro O.I., Ksendzova G.A., Polozov G.I., Sorokin V.L., Boreko E.I., Savinova O.V., Dubovik B.V., Bizunok N.A. Synthesis and study of antiviral and anti-radical properties of aminophenol derivatives // Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. – 2008. – Vol. 18. – № 7. – P. 2420-2423.
2. Tolstorozhev G.B., Belkov M.V., Skornyakov I.V., Polozov G.I., Sorokin V.L., Ksendzova G.A., Shadyro O.I. IR Fourier spectroscopy and pharmacological properties of phenols // Nonlinear phenomena in complex systems. – 2011. – Vol. 14. – № 3. – P. 282-289
3. Толсторожев Г.Б., Скорняков В.И., Бельков М.В., Шадыро О.И., Полозов Г.И., Сорокин В.Л., Ксендзова Г.А. Спектроскопические свойства фармакологически активных фенолов // Оптика и спектроскопия. – 2012. – Т. 112. – №5. – С. 758-765

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРИЗНАКИ ПРОЯВЛЕНИЯ ПРОТИВОМЕТАСТАЗНОЙ АКТИВНОСТИ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ С МЕТИЛЕНДИФОСФОНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Толсторожев Г.Б.¹, Скорняков И.В.¹, Пехньо В.И.²,
Козачкова А.Н.², Царик Н.И.², Шарыкина Н.И.³

¹*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь
e-mail: gbt@imaph.bas-net.by*

²*Институт общей и неорганической химии НАН Украины, Киев, Украина*

³*Институт фармакологии и токсикологии АМН Украины, Киев, Украина*

Онкологическое заболевание сопровождается биохимическими изменениями в таких молекулярных компонентах клеток как белки, липиды, нуклеиновые кислоты и углеводы. Процессы образования и перерождения опухоли могут проявляться в ИК спектрах биомолекул, что используется в диагностических целях [1]. Безусловный интерес представляет применение методов ИК-спектроскопии для анализа молекулярных изменений в раковых клетках при введении в организм различных противоопухолевых препаратов. Это позволит конкретизировать представления о фармакологических свойствах лекарственных соединений, установить на молекулярном уровне механизмы их действия на возникновение, развитие и лечение злокачественных опухолей.