

Синтез и исследование новых азокрасителей на основе функционально замещенных производных салициловой кислоты

© Кузьмина¹⁺ Надежда Михайловна, Ву² Тхи Нгок Ань,
Ковальчукова^{1,2*} Ольга Владимировна и Гусаров¹ Дмитрий Сергеевич

¹Кафедра органической химии. Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина
(Технологии. Дизайн. Искусство). ул. Садовническая, д. 33, стр. 1. г. Москва, 115035. Россия.

E-mail: nm-kuzmina@mail.ru

²Кафедра общей химии. Российский университет Дружбы Народов.
ул. Миклухо-Маклая, д.6. г. Москва, 117198. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: азокрасители, синтез, салициловая кислота, производные салициловой кислоты, компьютерный скрининг, инфракрасная спектроскопия.

Аннотация

С выходами 60-64% выделены три хроматографически чистых азокрасителя на основе салициловой кислоты и *para*-нитроанилина. Строение синтезированных соединений доказывали методом ИК спектроскопии. В спектрах соединений присутствуют характеристичные полосы поглощения, связанные с колебаниями O-H, N-H, C=O и N=N групп. Продукты выделились в виде оранжево-коричневых порошков, что соответствует соединениям с короткой системой сопряженных двойных связей. Определена преимущественная таутомерная форма существования синтезированных азосоединений – 5,5'-(диазен-1,2-диил)бис(2-гидроксibenзойной кислоты), 2-гидрокси-5-((4-нитрофенил)дiazенил)бензойной кислоты, 5-амино-2-гидрокси-4-((4-нитрофенил)дiazенил)бензойной кислоты. Показано, что все они существуют в виде азо-таутомеров. Для определения красящей способности потенциальных красителей было проведено тестовое крашение холодным способом образцов мультиткани, состоящей из шести основных типов ткани, используемых в текстильной промышленности, в условиях, соответствующих крашению кислотными и активными красителями. Установлена способность соединений выступать в качестве кислотных красителей, окрашивая шерстяное, полиамидное и ацетатное волокна в желто-оранжевую и бежево-коричневую гамму. Введение аминогруппы во фрагмент салициловой кислоты ослабляет колористические свойства молекулы азокрасителя. Расчет токсичности соединений при внутривенном и пероральном способах введения, проведенный по программе GUSAR, показывает их малую токсичность (4-5 класс токсичности). Введение аминогруппы в молекулу азокрасителя сопровождается увеличением его токсичности. Все выделенные соединения соответствуют правилу Липински, что указывает на их биодоступность. Прогнозирование биологической активности соединений, осуществленное с помощью программы PASS, показывает, что с вероятностью более 90% синтезированные соединения проявляют антисептические свойства, не раздражая кожу и слизистые оболочки. Это позволяет считать выделенные соединения перспективными для использования в качестве красителей в косметических средствах.