

Квантово-химическое моделирование, кристаллическая и молекулярная структура 2-цианометилен-4-тиазолидинона. Оценка биологической активности

© Полянская¹⁺ Надежда Александровна, Турсунов² Ислонжон Уктамжонович, Рябов¹ Михаил Алексеевич, Утеньшев^{3,4} Андрей Николаевич, Бычкова² Ирина Николаевна, Ковальчукова^{1,2*} Ольга Владимировна

¹ Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел.: +7 (926) 143-87-08. E-mail: polyanskaya-na@rudn.ru

² Кафедра органической химии; Кафедра неорганической и аналитической химии. Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство). ул. Малая Калужская, 1. г. Москва, 119071. Россия. Тел.: +7 (495) 955-35-58. E-mail: kovalchukova-ov@rudn.ru

³ Институт проблем химической физики РАН. пр-т академика Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия. Тел.: +7 (49652) 21-16. E-mail: office@icp.ac.ru

⁴ Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова. ул. Островитянова, 1. г. Москва, 117997. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: производные тиазолидин-4-она, квантово-химическое моделирование, рентгеноструктурный анализ, спектральные характеристики, биологическая активность.

Аннотация

По известной в литературе методике осуществлен синтез 2-цианометилтиазолидин-4-она (**I**). Методом РСА определена кристаллическая и молекулярная структура **I**. Согласно данным РСА, ЭСП, ЯМР ¹H и ИК спектроскопии, а также квантово-химическим расчетам соединение **I** в кристаллическом состоянии и в растворах присутствует в виде таутомера **Ib**. “Подвижный” атом Н локализован у атома N гетероцикла. Длина С=О связи составляет 1.2112(16) Å, что указывает на отсутствие сопряжения карбонильной группы с неподеленной парой электронов атома азота соседней NH группы. Изучено поведение растворов соединения **I** в этаноле ($\lambda_{\max} = 273$ нм, $I_{\text{ge}} = 4.37$) при добавлении 0.1 М растворов HCl ($\lambda_{\max} = 275$ нм, $I_{\text{ge}} = 4.35$) и NaOH ($\lambda_{\max} = 293$ нм, $I_{\text{ge}} = 4.48$). Полученные результаты указывают на сохранение таутомерной формы соединения **Ib** в кислой среде. Диссоциация N-H связи менее предпочтительна, чем диссоциация O-H связи, можно ожидать, что в щелочных растворах происходит превращение таутомерной формы **Ib** в форму **Ic**. Данное утверждение подтверждается квантово-химическими расчетами ионизированной формы молекулы **I**, которая батохромно смещена относительно полосы неионизированного таутомера **Ib** и имеет значительно большую силу осциллятора. Наличие длинноволнового плеча в спектрах нейтральных растворов указывает на частичную диссоциацию соединения **I**. Согласно проведенным расчетам установлено, что все возможные таутомерные формы можно отнести к группе нетоксичных или малотоксичных соединений, а установленная форма **Ib** имеет наибольшую биологическую активность.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Полянская Н.А., Турсунов И.У., Рябов М.А., Утеньшев А.Н., Бычкова И.Н., Ковальчукова О.В. Квантово-химическое моделирование, кристаллическая и молекулярная структура 2-цианометилен-4-тиазолидинона. Оценка биологической активности. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.69. №3. С.50-57. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-3-50.

или

Nadegda A. Polyanskaya, Islomjon U. Tursunov, Michail A. Ryabov, Andrey N. Utenychev, Irina N. Bychkova, Olga V. Kovalchukova. Quantum-chemical modeling, crystal and molecular structure 2-cyanomethylene-4-thiazolidinone. Assessment of biological activity. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.69. No.3. P.50-57. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-69-3-50. (Russian)