

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗАЛЬДЕГИДОВ

Артюхов В.Я.^а, Базыль О.К.^а, Бельков М.В.^б,
Першукевич П.П.^б, Шадыро О.И.^в, Самович С.Н.^в

^а *Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, пр. Ленина 36,
e-mail: victor.art@rambler.ru*

^б *Институт физики НАН Беларуси, 220072, Минск, пр. Независимости, 70
в Белорусский государственный университет, 220030, Минск, пр. Независимости, 4*

Широко распространенные в природе замещенные бензальдегиды про-являют антибактериальную, противовоспалительную, противовирусную, антиканцерогентную активность при низкой токсичности, что делает их перспективными в медицине. В докладе представлены результаты экспериментального и теоретического изучения спектрально-люминесцентных свойств четырех замещенных бензальдегидов: о-анисового и сиреневого бензальдегидов, ванилина и 2,3-гидроксibenзальдегида. Получены экспериментальные спектры поглощения, флуоресценции и возбуждения флуо-ресценции. Структура исследованных молекул зависят от pH среды и по-этому помимо нейтральной возникают и их ионные формы. Методом ЧПДПс использованием оригинальной спектроскопической параметризации¹ рассчитаны спектры поглощения и флуоресценции, константы ско-ростей фотофизических процессов (излучательных и безызлучательных) и физико-химические свойства нейтральных и ионных форм молекул. Расчеты показали, что в нейтральных формах всех исследованных соединений состояние S_1 формируется переходом $\pi\pi^*$ -типа как в погло-щении, так и во флуоресценции. Основным каналом распада флуоресцентного состояния в них является ST-конверсия. Поэтому нейтральные формы замещенных бензальдегида не являются источником флуоресценции, наблюдаемой экспериментально. В ионных формах имеет место инверсия $\pi\pi^*$ - и $\pi\pi^*$ -состояний, а флуоресценция ванилина, анисового и сиреневого альдегидов в этаноле излучается катионными формами этих соединений. Конечной целью исследований является разработка новых критериев и методик прогнозирования фармакологической активности биомолекул.

Литература

1. Артюхов В.Я., Копылова Т.Н., Самсонова Л.Г. и др. Известия вузов. Физика, 2008, 51, № 10, 93.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного зада-ния Минобрнауки России, проект № 4.6027.2017/8.9.