



***СТУДЕНТСКА
НАУЧНА
СЕСИЯ
2017***

КОНФОРМАЦИОНЕН АНАЛИЗ НА БЕНЗОХИДРАЗИДИ С АНТИМИКОБАКТЕРИАЛНА АКТИВНОСТ

**Валентин Р. Карабелъв³, Н. В. Маркова¹, Н. Г. Василев¹, М. И.
Рогожеров¹, Б. Шивачев², В. Т. Ангелова³**

¹ *Институт по органична химия с Център по фитохимия, Българска академия на науките, 1113 София, България*

² *Институт по минералогия и кристалография, Българска академия на науките, 1113 София, България*

³ *Фармацевтичен факултет, Медицински университет – София, Катедра - Химия, 1000 София, България*

Структурите на наскоро синтезирани *N'*-[(*E*)-(2-метил-2*H*-хромен-3-ил)метилен]бензохидразид **1** и *N'*-[(*E*)-(2-метил-2*H*-хломен-3-ил)бензиден]пиридин-4-карбохидразид **2** с антимикобактериална активност са потвърдени с помощта на ИЧ, ¹H и ¹³C ЯМР спектроскопия. За да се локализира най-стабилните конформери е направен конформационен анализ спрямо всички прости връзки на ниво B3LYP/6-31+G(d,p) в газова фаза и в разтвор (диметил сулфоксид, ДМСО и хлороформ). Установено е, че въртенето около торзионните ъгли O=C-NH и C=N-N-C е важно при конформационния анализ. Една от структурите, получена при въртене около торзионния ъгъл O=C-NH, имаща *cis*-конформация е най-стабилна в газова фаза. Локализирани са още два конформера със сравнима енергия, при ротация около ъгъл O=C-NH и C=N-N-C. Двете най-стабилни структури на ниво B3LYP/6-31+G(d,p), получени след ротация около ъгъл O=C-NH и при двете съединения са оптимизирани и на ниво MP2/6-31+G(d,p) в газова фаза и разтвор. Изчислените в разтворител (ДМСО и хлороформ) енергетични разлики и бариери на ротация между двата най-стабилни ротамера, както и експериментално установените чрез ЯМР спектроскопия бариери на ротация показват, че те би трябвало да присъстват в разтвор (преимуществено се образува *trans*-конформация), и се намират в бързо равновесие, като концентрациите им зависят от полярността на разтворителя. Теоретично предсказаните ИЧ честоти, ¹H и ¹³C ЯМР химични отмествания на двете съединения са близки до експериментално установените.

Начин на представяне - Участие в постерна сесия