



---

**Original Article: SISTEMI DI RICERCA ORIENTATA, MOLECOLE FORMATE DA ESTERI DELL'ACIDO p-(N-GLYUKOZILIDEN) AMMINOBENZOATO**

**Citation**

Volkova T.G., Sterlikova I.O., Soboleva Ju.V. Sistemi di ricerca orientata, molecole formate da esteri dell'acido p-(N-glyukoziliden) amminobenzoato. *Italian Science Review*. 2014; 2(11). PP. 34-38.  
Available at URL: <http://www.ias-journal.org/archive/2014/february/Volkova-Sterlikova.pdf>

**Authors**

Tatiana G. Volkova, Cand. Chem. Sci., Docent, Ivanovo State University, Russia.

Irina O. Sterlikova, Cand. Chem. Sci., Ivanovo State Medical Academy, Russia.

Julia V. Soboleva, graduate student, Ivanovo State University, Russia.

Submitted: February 14, 2014; Accepted: February 20, 2014; Published: February 28, 2014

Potenziale di ricerca composti contenenti mesomorfo nei carboidrati struttura, sta diventando sempre più importante. [8] Ciò è dovuto principalmente al fatto che monosaccaridi con una lunga catena alchilica si comportano come cristalli liquidi (CL) legami idrogeno con [5]. Inoltre, a seconda del rapporto delle porzioni idrofile e idrofobe nella molecola con un componente di carboidrati del CL in struttura, possono manifestarsi anche come LC termotropico e liotropico [6]. In [1, 7] è dimostrato che la comparsa di proprietà mesomorfa può essere associato con auto-assemblato CL supramolecolare causa di specifiche interazioni intermolecolari di sostituenti nelle molecole mesogeni attivi. In relazione a questo studio, da un lato, le proprietà mesomorfa di nuovi materiali, quali frammenti sono in grado di formare legami idrogeno (legami H), dall'altro, gli effetti di tali legami per formare collegate molecolari, e la possibile formazione di sistemi orientati è rilevante.

In questo lavoro, metodi di microscopia polarizzante, calorimetria a scansione differenziale, e dielkometrii birifrangenza

elettrica studiati proprietà mesomorfi della temperatura di transizione di fase, le caratteristiche strutturali delle molecole esteri dell'acido p-(N - glyukoziliden) acido aminobenzoico (Fig. 1) e la possibile formazione di associati causa idrogeno cravatte.

La struttura della indagato esteri p-(N - glyukoziliden) - acido aminobenzoico, costituito da una porzione centrale (core) della molecola, che include il gruppo - N=CH e flessibili (mobile) gruppi terminali azometina, non proprio adatto alla struttura tradizionale delle molecole mesogenic calamità (Fig. 2).

Studi mesomorfo proprietà di questi composti polarizzando microscopia ha mostrato segni omologhi mesomorphism hanno una struttura lineare al gruppo carbossilico di radicali con atomi di carbonio, 4, 5, 9, confermato mediante calorimetria differenziale a scansione [9]. In particolare, butile p-(N - glyukoziliden) amminobenzoato ha mostrato un forte effetto mesomorphism enantiotropic di surraffreddamento. Tuttavia, i dati di questi metodi non sono coerenti con i risultati

degli studi elettro-ottica delle fasi isotropa. Comportamento di questi composti non è standard e non precedentemente descritto in letteratura.

Per studiare la rigidità strutturale della porzione glucosio in questi composti sono stati identificati possibile conformazione dell'estere pentile molecola di p-(N - glyukoziliden) aminobenzoico. Per questa procedura iniziale di ottimizzazione della geometria è stata eseguita senza imporre restrizioni sul tipo di simmetria. Per eliminare il falso minimo, realizzato con cura il tipo di controllo del punto stazionario. Assenza di frequenze immaginarie negli spettri delle vibrazioni normali suggerisce raggiungere la vera minima sulla superficie di energia potenziale. Analisi conformazionale della porzione glucosio tenutasi a ravvicinamento B3LYP/6-31G (PC GAMESS) [2]. Minimizzazione di energia e di trovare minimi locali sono state effettuate ad un valore fisso di variazione determinato angolo diedro e tutti gli altri parametri geometrici della molecola. La rotazione di gruppi di atomi tenuti in sequenza attorno alle obbligazioni C-C che formano parte del glucosio:  $N_2-C_1-C_{33}-C_{34}$ ,  $C_1-C_{33}-C_{34}-C_{38}$ ,  $C_{33}-C_{34}-C_{38}-C_{42}$ ,  $C_{34}-C_{38}-C_{42}-C_{46}$ ,  $C_{38}-C_{42}-C_{46}-H_{50}$ ,  $C_{38}-C_{42}-C_{46}-O_{52}$  (Fig. 3).

Analisi dei dati ha mostrato che il numero di conformeri è uguale a quattro, e in tutto conformazione stabile del frammento  $N_2-C_1-C_{33}-C_{34}-C_{38}$  a causa del legame idrogeno  $O_{40}-H_{41}...N_2$ . La rigidità di questa parte della molecola è evidenziato da una sufficientemente elevata barriera di rotazione intorno al legame  $C_1-C_{33}$  (8,5 kcal/mol). Angle  $C_{34}-C_{38}-C_{42}-C_{46}$  nella più probabile conformero è conformazione cis per l'altra caratteristica conformazione gauche.

Il contenuto di tali componenti funzionali reattivi, quali gruppi OH in grado di formare più legami idrogeno porta al fatto che l'estere molecola pentile di p-(N - glyukoziliden) aminobenzoico porzione acido di glucosio, ci sono diversi legami idrogeno intermolecolari (Fig. 3). La

presenza di questi N -bond è vantaggioso perché porta alla formazione di un abbastanza stabili anelli a sei elementi. Cambiando l'angolo di torsione  $C_{34}-C_{38}-C_{42}-C_{46}$  influenze prodotte da legame idrogeno intramolecolare: il passaggio da una gauche cis - (+) conformazione è distrutto due legami H e la formazione di nuovo, e al passaggio al gauche (-) tutti rimangono comunicazione.

Per studiare la formazione dei soci a causa di interazioni intermolecolari utilizzando DFT/6-31G (PC GAMESS) [2], senza imporre restrizioni sul tipo di simmetria è stato simulato dimeri pentile estere p-(N - glyukoziliden) aminobenzoato con diversa disposizione reciproca delle molecole. Morokumy metodo [3, 4] (HF/6-31G (GAMESS PC) [2]) calcolato l'energia di interazione e dei suoi componenti nei sistemi molecolari indagati.

È stato costruito otto modelli dimero che differivano orientamento reciproco delle molecole pentile estere p-(N - glyukoziliden) acido aminobenzoico rispetto all'altro, ma solo sei sono stati trovati legami idrogeno intermolecolari (Fig. 4). Legame idrogeno intramolecolare, ciclo di chiusura  $N_2-C_1-C_{33}-C_{34}-O_{40}-H_{41}$  (Fig. 3) è molto forte ed è presente nella struttura di molecole in tutti i modelli dimeri studiati.

Dimostrato che l'energia di interazione di due molecole ( $\Delta E$ ) dipende non solo dal numero di legami idrogeno formate, ma la disposizione reciproca delle molecole. Ad esempio, i modelli di dimeri e d (Fig. 4)  $\Delta E$  ha valori simili (-26,40 kcal/mol e -24,23 kcal/mol, rispettivamente), ma il dimero in tre legami H, e g modello - solo due. Tuttavia, questi due legami idrogeno sono più brevi e quindi più potente.

Confrontando il modello con lo stesso numero di legami H, si può notare che l'orientamento delle molecole rispetto all'altro colpisce  $\Delta E$ , la lunghezza dei legami idrogeno. Così, in un modello di dimero simmetrico  $\Delta E$  è -26,4 kcal/mol a lunghezze di H - bond 1,72 Å, 1,70 Å, 1,74

Å, e nel modello di dimero e in lunghezze di legami H 1,68 Å, 1,55 Å, 1,74 Å  $\Delta E = -20,03$  kcal/mol.

$\Delta E$  praticamente la stessa caratteristica per i modelli dimero B e E con due legami H (-16,06 kcal/mol e -16,43 kcal/mol, rispettivamente). Le lunghezze dei legami idrogeno in questi modelli sono anche molto vicino.

Pertanto, nonostante la presenza nel estere struttura pentile di p-(N-glyukoziliden) acido aminobenzoico nella porzione glucosio di legami idrogeno intramolecolari, possiamo ipotizzare la formazione di intermolecolare e che porterà ad un aumento della parte "rigida" della molecola e una maggiore probabilità di proprietà mesomorfo.

**References:**

1. Deebika, B., Balamurugan, S., Kannan, P. 2012. Journal of Polymer Research. V. 19. 7. P. 9920.

2. Granovsky, A.A. PCGAMESS version 7.1.  
 3. Morokuma, K.A. 1976. International Journal of Quantum Chemistry. V. X. pp.: 325-327.  
 4. Morokuma, K.A. J. Chem. Phys. 1971. V. 55. pp.: 1236-1244.  
 5. Noller, C.R., Rockwell, W.C. J. Am. Chem. Soc. 1938. V. 60. P. 2076.  
 6. Singh, M.K., Xu, R., Moebs, S., Kumar, A., Queneau, Y., Cowling, S.J., Goodby, J.W. Chem. Eur. J. 2013. V.19. pp.: 5041-5049.  
 7. Uchida, Y., Suzuki, K., Tamura, R. J. Phys. Chem. B. 2012. V. 116. 32. pp.: 9791-9795.  
 8. Nurkenov, O.A., Gazalieva, M.A., Kulakov, I.V. et al 2006. Herald Karaganda University. 1. Chemistry series. pp.: 48-62.  
 9. Yashkova, E.V., Nasibulin, A.A., Volkova, T.G. et al, 2013. Liquid crystals and their use. Issue 1 (43). pp.: 20-27.

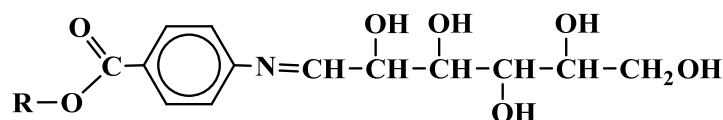


Fig. 1. Esteri di p-(N-glyukoziliden) amminobenzoato (R - un radicale alifatico con una struttura lineare o ramificato, contenente da 1 a 9 atomi di carbonio)

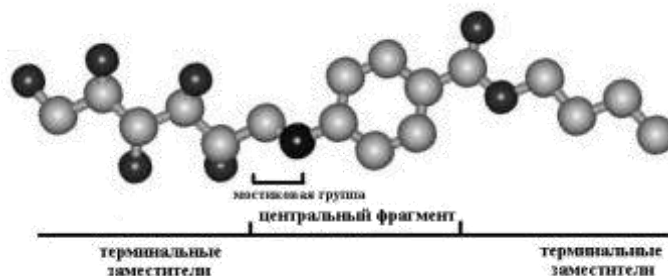


Fig. 2. La struttura di n-butil etere p-(N-glyukoziliden) amminobenzoato

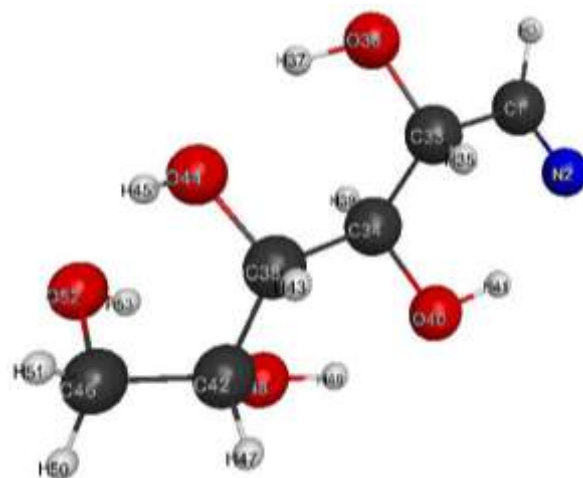
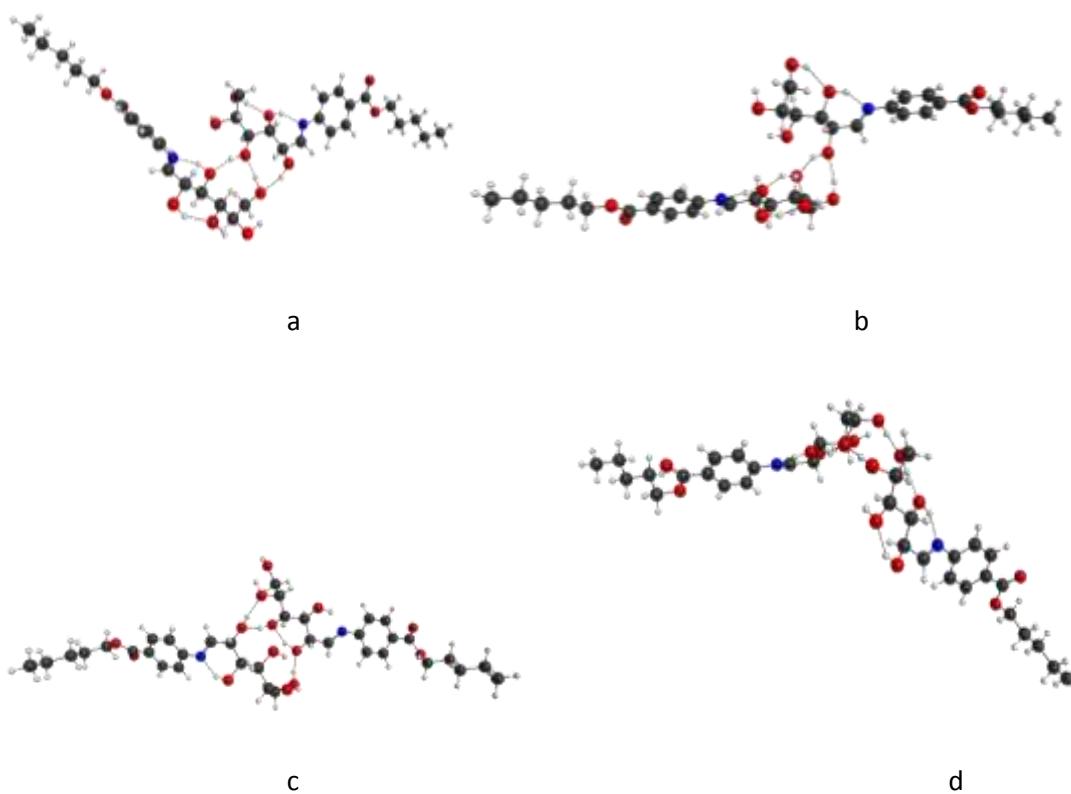


Fig. 3. La numerazione degli atomi nella porzione glucosio dell'estere pentile molecola di p-(N-glyukoziliden) acido aminobenzoico marcato con legami idrogeno



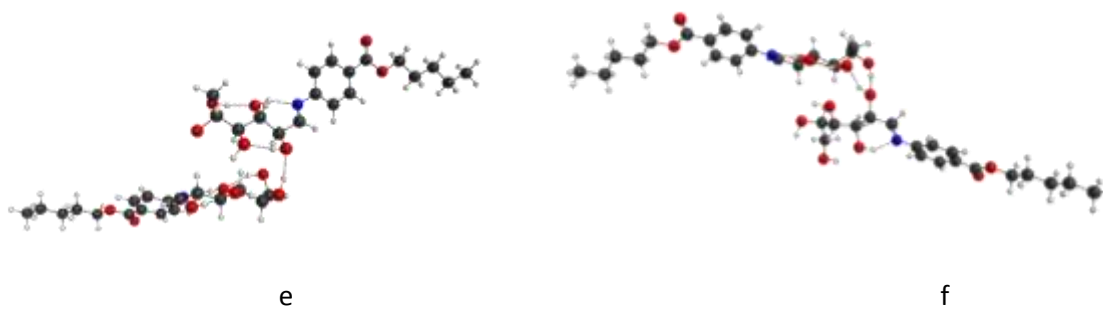


Fig. 4. Dimer modello pentile estere  
 p-(N-glyukoziliden) aminobenzoato (versioni "a" e "c" della molecola sono collegate da tre  
 legami idrogeno, "b", "d", "f" - due, "e" - uno)