

CZU: 615.214.32.074:543.422.3-74

APLICAREA METODEI SPECTROFOTOMETRICE ÎN INFRAROȘU PENTRU IDENTIFICAREA DIOXOINDOLINONEI

Tatiana ȘTEFANEȚ^{*1,2}, Eugenia STÎNGACI³, Silvia MELNIC³, Vladimir VALICA^{1,2},
Fliur MACAEV^{2,4}

¹Catedra de chimie farmaceutică și toxicologică, ²Centrul de dezvoltare a Medicamentului, ³Catedra de chimie generală, Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu” din Republica Moldova; ⁴Laboratorul sinteză organică, Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova

Autor corespondent*: tatiana.stefanet@usmf.md

Introducere. Metoda spectrofotometrică în infraroșu (IR) este o metodă optică spectrală utilizată pentru confirmarea structurii compușilor nou-sintetizați sau identificarea substanțelor medicamentoase, bazată pe absorbția unor radiații din acest domeniu.

Scopul lucrării. Cercetarea și descrierea spectrului IR a Dioxoindolinonei – potențial produs autohton cu acțiune anxiolitică și antidepresivă (conform studiilor preliminare).

Material și metode. Spectrele FTIR au fost înregistrate la spectrometrul FTIR cu accesoriu ATR (reflexie totală atenuată) Spectrum-100 Perkin-Elmer în intervalul 4000-650 cm^{-1} în cadrul Institutului de Chimie, USM.

Rezultate. În analiza spectrului IR al Dioxoindolinonei, s-a urmărit identificarea benzilor de absorbție specifice substanței studiate. Trei benzi de absorbție la 3066, 2972 și 2903 cm^{-1} , au fost atribuite diferitelor tipuri de vibrații de întindere C-H (inel aromatic, grupări metil și metilen). Regiunea „amprentelor digitale” (1700-400 cm^{-1}) conține benzi de absorbție înguste și de intensitate mare, asociate vibrațiilor specifice ale legăturilor chimice din molecula dată. Cea mai intensă bandă spectrală la 1735-1718 cm^{-1} este atribuită vibrației $\nu(\text{C}=\text{O})$. Ea este relativ lată din cauza prezenței a două grupe C=O distincte, ale căror benzi se suprapun. Benzile caracteristice ale inelului benzenic, $\nu(\text{C}=\text{C})$, se observă la 1619 și 1473 cm^{-1} . Regiunea 1210-977 cm^{-1} evidențiază benzi de deformare planare, $\delta(\text{C}-\text{H})$ din segmentul aromatic. Vibrațiile de deformare neplanare C-H ale inelului benzenic 1,2-substituit apar la 750 cm^{-1} , această bandă, confirmă prezența a patru atomi de hidrogen adiacenți la sistemul benzenic, indicând că acesta este orto-bisubstituit. Benzile de absorbție din intervalul 1495-1366 cm^{-1} sunt atribuite vibrațiilor de deformare ale grupurilor CH-, -CH₂- și CH₃-. Pentru grupul CH₃-, vibrațiile de deformare ale atomilor de hidrogen generează două benzi în spectru: banda la 1495 cm^{-1} , $\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$, și cea la 1366 cm^{-1} , atribuită $\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$. Grupa -CH₂- este reprezentată de o bandă de absorbție de intensitate medie la 767 cm^{-1} . Benzile de absorbție intense la 1291 cm^{-1} și 1075 cm^{-1} sunt asociate cu vibrațiile $\nu_{\text{as}}(\text{C}-\text{O}-\text{C})$ și $\nu_{\text{s}}(\text{C}-\text{O}-\text{C})$, respectiv. Benzile de absorbție ale vibrațiilor de valență ale grupului C-N, de diferite tipuri, se regăsesc în intervalul 1103-1320 cm^{-1} . Vibrațiile $\nu(\text{C}-\text{N}-\text{C})$ apar ca o bandă puternică la 1135 cm^{-1} .

Concluzii. A fost cercetat spectrul IR de absorbție al Dioxoindolinonei, evidențiind benzi de absorbție care diferențiază Dioxoindolinona de alte substanțe și permit utilizarea lor pentru demonstrarea structurii și identificarea acesteia.

Cuvinte cheie. Dioxoindolinonă, spectrofotometria în IR.

Bibliografie.

J.M. Chalmers, P.R. Griffiths: „Handbook of Vibrational Spectroscopy. Theory and Instrumentation”, John Wiley & Sons Ltd., 2002.

Autorii sunt recunoscători pentru finanțarea acestei cercetări în cadrul subprogramului „Dezvoltarea produselor farmaceutice noi din materie primă locală” (codul 080301).

CZU: 615.214.32.074:543.422.3-74

APPLICATION OF THE INFRARED SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR THE IDENTIFICATION OF DIOXOINDOLINONE

Tatiana ȘTEFANET^{*1,2}, Eugenia STÎNGACI³, Silvia MELNIC³, Vladimir VALICA^{1,2},
Fliur MACAEV^{2,4}

¹Department of Pharmaceutical and Toxicological Chemistry, ²Drug Development Center, ³Department of General Chemistry, Nicolae Testemițanu State University of Medicine and Pharmacy of the Republic of Moldova; ⁴Organic Synthesis Laboratory, Institute of Chemistry, Moldova State University

Autor corespondent*: tatiana.stefanet@usmf.md

Introduction. The infrared (IR) spectrophotometric method is a spectral optical method used for the confirmation of the structure of newly synthesized compounds or the identification of drug substances, based on the absorption of some radiation varieties in this field.

Aim of the study. Research and description of the IR spectrum of Dioxoindolinone – potential native product with anxiolytic and antidepressant action (according to preliminary studies).

Material and methods. FTIR spectra were recorded on a Spectrum-100 Perkin-Elmer FTIR spectrometer with an ATR (attenuated total reflection) accessory in the range 4000-650 cm⁻¹ at the Institute of Chemistry, USM.

Results. In the analysis of the IR spectrum of Dioxoindolinone, it was aimed to identify absorption bands specific to the studied substance. Three absorption bands at 3066, 2972 and 2903 cm⁻¹, were assigned to different types of C-H stretching vibrations (aromatic ring, methyl and methylene groups). The „fingerprint” region (1700-400 cm⁻¹) contains narrow and high-intensity absorption bands associated with specific vibrations of the chemical bonds in the given molecule. The most intense spectral band at 1735-1718 cm⁻¹ is attributed to the $\nu(\text{C}=\text{O})$ vibration. It is relatively broad due to the presence of two distinct C=O groups, whose bands overlap. The characteristic bands of the benzene ring, $\nu(\text{C}=\text{C})$, are observed at 1619 and 1473 cm⁻¹. The 1210-977 cm⁻¹ region highlights planar strain bands, $\delta(\text{C}-\text{H})$ from the aromatic segment. The C-H out-of-planar bending vibrations of the 1,2-substituted benzene ring appear at 750 cm⁻¹, this band, confirming the presence of four hydrogen atoms adjacent to the benzene system, indicating that it is ortho-bisubstituted. The absorption bands in the range 1495-1366 cm⁻¹ are attributed to the deformation vibrations of the CH-, -CH₂- and CH₃- groups. For the CH₃- group, the deformation vibrations of the hydrogen atoms generate two bands in the spectrum: the

band at 1495 cm^{-1} , $\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$, and the one at 1366 cm^{-1} , assigned to $\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$. The $-\text{CH}_2-$ group is represented by an absorption band of average intensity at 767 cm^{-1} . The intense absorption bands at 1291 cm^{-1} and 1075 cm^{-1} are associated with the $\nu_{\text{as}}(\text{C-O-C})$ and $\nu_{\text{s}}(\text{C-O-C})$ vibrations, respectively. The absorption bands of the valence vibrations of the C-N group, of various types, are found in the range $1103\text{--}1320\text{ cm}^{-1}$. The $\nu(\text{C-N-C})$ vibrations appear as a strong band at 1135 cm^{-1} .

Conclusions. The IR absorption spectrum of Dioxoindolinone was investigated, revealing absorption bands that differentiate Dioxoindolinone from other substances and allow their use for structure demonstration and identification.

Key words. Dioxoindolinone, IR spectrophotometry.

Bibliography.

J.M. Chalmers, P.R. Griffiths: „Handbook of Vibrational Spectroscopy. Theory and Instrumentation”, John Wiley & Sons Ltd., 2002.

The authors are grateful for the funding of this research under the subprogramme „Development of new pharmaceutical products from local raw material” (code 080301).

Authors' ORCID

Tatiana Ștefanet <https://orcid.org/0000-0003-2060-8382>
Eugenia Stîngaci <https://orcid.org/0000-0003-0731-3424>
Silvia Melnic <https://orcid.org/0000-0002-8498-024X>
Vladimir Valica <https://orcid.org/0000-0002-1068-5504>
Fliur Macaev <https://orcid.org/0000-0002-3094-1990>