

Właściwości kwasu salicylowego i jego wybranych pochodnych w świetle metod modelowania molekularnego = Properties of salicylic acid and its selected derivatives in the light of molecular modeling methods

Autorzy

Anna Kaczmarek

Beata Kizior

Wiktor Zierkiewicz

Aneta Jezierska

Rok wydania

2023

Czasopismo

Chemik

Numer woluminu

72

Strony

66-70

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Salicylates have been used for centuries as medicine for various ailments. Many compounds of this group were obtained as a result of modification of salicylic acid, such as acetylsalicylic acid (a popular aspirin drug) and phenyl salicylate (Salol). Salicylic acid, which is the main metabolite of salicylates, is also an interesting compound. Quantum-chemical simulations based on Density Functional Theory (DFT) in the gas phase, as well as in the presence of a continuum solvation model, were performed for the mentioned molecules. The effect of intramolecular hydrogen bonding, present in salicylic acid and phenyl salicylate, on the properties of the molecules was taken into account in the study. Topological and electron structure analyses of the molecules were carried out according to the Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) and the Non-Covalent Interactions (NCI) index.

Salicylany są stosowane od wieków jako leki na różne dolegliwości. Wiele związków z tej grupy powstało w wyniku modyfikacji kwasu salicylowego, np. kwasu acetylosalicylowego (popularnego leku aspiryny) czy salicylanu fenylu (Salolu). Interesującym związkiem jest również kwas salicylurowy, będący głównym metabolitem salicylanów. Dla wspomnianych cząsteczek wykonano symulacje kwantowo-chemiczne w oparciu o Teorię Funkcjonału Gęstości (DFT) w fazie gazowej, a także w obecności rozpuszczalnika. Wpływ wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego, obecnego w kwasie salicylowym i salicylanie fenylu, na właściwości cząsteczek został również uwzględniony w badaniach. Analizę topologiczną i struktury elektronowej badanych cząsteczek wykonano według Kwantowej Teorii Atomów w Cząsteczkach (QTAIM) oraz Indeksu Oddziaływań Niekowalencyjnych (NCI).

Słowa kluczowe

salicylic acid, salicylates, hydrogen bond, DFT, QTAIM, NCI

kwasy salicylowe, salicylany, wiązanie wodorowe, DFT, QTAIM, NCI

Adres publiczny

<https://yadda.icm.edu.pl/baztech/element/bwmeta1.element.baztec410150fe-2811-49b2-a3de-6e64e2ab070e?q=bwmeta1.element.baztech-5d2f9117-72f8-4510-84f0-400526873119;6&qt=CHILDREN-STATELESS>

Plik został wygenerowany dnia 2026-06-17 05:44:48

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/repozytorium/9WZABYz>.