

УДК 548.737:547.914

**ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ МЕЖДУ КАТЕХОЛОВЫМИ ГРУППАМИ
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ ДИГИДРОКОФЕИНОВОЙ КИСЛОТЫ****Т.Н. Дребущак^{1,2}, Е.В. Болдырева^{1,2}, К. Фуке^{3,4}**¹Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

E-mail: tanya@xray.nsu.ru

²Научно-образовательный центр "Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии" при Новосибирском государственном университете³Химический факультет Университета Дарэма, Великобритания⁴Институт фармации Университета Инсбрука, Австрия

Статья поступила 29 марта 2012 г.

Дигидрокофеиновая кислота, $C_9H_{10}O_4$, относится к группе природных антиоксидантов. Впервые определена кристаллическая структура дигидрокофеиновой кислоты, кристаллографические данные при 100 К: $a = 11,3189(4)$, $b = 5,5824(1)$, $c = 13,8431(4)$ Å, $\beta = 109,248(4)^\circ$, $V = 825,80(4)$ Å³, пространственная группа $P2_1/c$, $Z = 4$. Помимо образования обычных для кислот водородных связей, присутствуют некоторые особенности, важные с точки зрения реакционной способности молекул дигидрокофеиновой кислоты. Положение одного из атомов водорода гидроксила катехоловой группы даже при 100 К разупорядочено. В кристаллической структуре кофеиновой кислоты такого разупорядочения не наблюдается.

Ключевые слова: катехоловые соединения, водородные связи, дигидрокофеиновая кислота, рентгеноструктурный анализ.

Дигидрокофеиновая кислота ($C_9H_{10}O_4$, 3-(3,4-дигидроксифенил)пропионовая кислота, рис. 1, а) относится к нефлавоноидным катехоловым соединениям и обладает антиоксидантными и антимутагенными свойствами [1–3]. Дигидрокофеиновая кислота содержится во многих растениях, выделенная в чистом виде при нормальных условиях она находится в кристаллическом состоянии. В работах [4, 5] исследовали антиоксидантные свойства и реакционную способность ряда катехоловых соединений, в том числе и с использованием расчетных методов. Важную роль в реакционной способности катехоловых соединений играет локализация атома водорода ОН-группы в положении С4' ароматического кольца. Для проведения расчетов необходимо знать геометрические характеристики молекулы и ее окружения. В работах [1, 2, 4] антиоксидантные свойства изучались в сравнении с другим природным антиоксидантом, кофеиновой кислотой, наблюдались существенные различия по некоторым параметрам. Различия могут быть связаны со структурными особенностями этих соединений. Для того чтобы найти такую взаимосвязь, необходимо знать кристаллические структуры соединений. Если кристал-

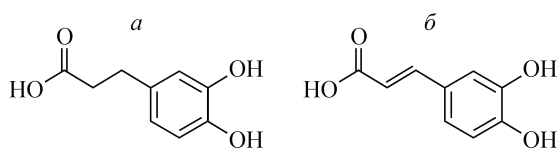


Рис. 1. Структурные формулы дигидрокофеиновой кислоты (а) и кофеиновой кислоты (б)