

ТАУТОМЕРНОЕ СОСТОЯНИЕ И КИСЛОТНО–ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА АЦИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3-АМИНО-1-(2',4',6'-ТРИХЛОРФЕНИЛ)ПИРАЗОЛИН-2-ОНА-5

© Шамс Эль-Дин Хашим Абдель-Хафез, Мовчан Александр Иванович*[†]
и Чмутова Галина Алексеевна*

Кафедра органической химии. Казанский государственный университет. Ул. Кремлевская, 18.
г. Казань 420008. Россия. Тел.: (8432) 315-462. E-mail: Alec.Movtshan@ksu.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ациламинозамещенные пиразолон-5, синтез, кислотно-основное равновесие, квантово-химический расчет.

Резюме

Методами ИК и ЯМР ¹H спектроскопии установлено, что 3-ацетиламино- (II) и 3-бензоиламино-1-(2',4',6'-трихлорфенил)пиразолин-2-он-5 (III) в твердом состоянии, а также в неполярных и малополярных растворителях находятся в СН-таутомерной форме. Охарактеризована структура продуктов ацетилирования и бензоилирования соединений (II) и (III). Определены рКа кислотно-основных равновесий ациламинозамещенных пиразолонов в водно-диоксановой среде (50:50). Методом РМЗ рассчитаны энергии и заряды на атомах изученных молекул и анионов, образующихся из них при депротонировании.