

Квантово-химические дескрипторы кислотности сульфанилидов по Бренстеду

© **Вирзум¹⁺ Людмила Викторовна, Крылов^{2*} Евгений Николаевич**

¹ Кафедра агрохимии, химии и экологии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия им. Д.К. Беляева. ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@list.ru

² Кафедра фундаментальной и прикладной химии. Ивановский государственный университет. ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: +7 (4932) 37-37-03. E-mail: EugenNKrylov@gmail.com

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфанилиды, теория DFT, заряды по Хиршфельду, молекулярный электростатический потенциал, электронный химический потенциал, жёсткость, электрофильность, кислотность по Бренстеду.

Аннотация

Основным достижением концептуальной DFT, является теоретическое обоснование и проверка возможности практического применения молекулярных параметров молекул – дескрипторов – для описания реакционной способности структур интермедиатов и переходных состояний. Дескрипторы являются численными характеристиками структурных особенностей молекул и отвечают за проявление определённых химических и физико-химических свойств молекул. Применение теоретических основ теории DFT в варианте QSAR-QSPR к протолитическим равновесиям кислот и оснований позволяют рассматривать зависимость между кислотностью сульфанилидов и рядом квантово-химических параметров – дескрипторов химической активности исследованных молекул. В рамках работы определены некоторые параметры молекул, такие как: величины зарядов по Хиршфельду, энергии граничных орбиталей, молекулярный электростатический потенциал на атоме сульфамидного азота, электронный химический потенциал, жёсткость и электрофильность, рассматриваемые в рамках метода концептуальной DFT и количественной теории жёстких мягких кислот и оснований Пирсона. Проведён квантово-химический расчёт ядернозамещённых сульфанилидов общей формулы XPhNHSO₂PhY на уровне теории DFT M06/6-311++G** с учётом неспецифической сольватации в среде H₂O в рамках модели континуальной универсальной сольватации метода SMD (Solvation Model based on Density) без ограничений по типу симметрии. Обнаружено, что *син*-конформеры исследованных производных сульфанилидов стабилизированы относительно *анти*-конформеров электронодонорным эффектом заместителей вследствие π - π -взаимодействия, что подтверждается линейной корреляцией между энергией стабилизации и σ -константами заместителей. Обнаружены симбатные однопараметрические зависимости между кислотностью сульфанилидов по Бренстеду и указанными выше квантово-химическими параметрами этих молекул (за исключением жёсткости). Рассмотренные квантово-химические параметры имеют физический смысл, что определяет их предсказательную способность для определения кислотности по Бренстеду для тех сульфанилидов, у которых кислотность неизвестна. Обнаруженные линейные корреляции не уступают по качеству статистических параметров многопараметрическим математическим моделям, однако, в отличие, от последних, имеют вполне определённый физический смысл.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Вирзум Л.В., Крылов Е.Н. Квантово-химические дескрипторы кислотности сульфанилидов по Бренстеду. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №12. С.35-43. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-35

или

Lyudmila V. Virzum, Evgeny N. Krylov. Quantum chemical descriptors of sulfanilides Brønsted Acidity. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.12. P.35-43. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-35. (Russian)