

Электронное строение, ионные равновесия и комплексообразование некоторых производных 1-фенил-3-метилпиразолона-5

© Ковальчукова Ольга Владимировна,^{1*+} Волянский Олег Вениаминович,^{2*}
Страшнов Павел Викторович,¹ Королев Олег Васильевич,²

Страшнова Светлана Болеславна^{1*} и Епифанова Татьяна Алексеевна¹

¹ Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов. Ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел.: (495) 955-08-60. E-mail: okovalchukova@mail.ru

² Кафедра органической химии. Московский государственный текстильный университет им. А.Н. Косыгина. Ул. Малая Калужская, д. 1. г. Москва, 119071. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: комплексные соединения, производные фенилазопиразолона-5, спектральные характеристики, константы образования, квантово-химические расчеты.

Аннотация

Изучены процессы комплексообразования ряда производных фенилазопиразолона-5 в водно-этанольных растворах, методом спектрофотометрического титрования определены константы депротонирования органических молекул и константы образования комплексных соединений. В приближении метода теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP и валентно-двухэкспонентного базисного набора 6-31+G(d) изучено таутомерное превращение органических молекул и проведено моделирование электронных спектров поглощения азо-, гидразо- и анионной форм.