

Структура и свойства ароматических и жирноароматических азометинов

© Волкова Татьяна Геннадьевна⁺ и Клюев Михаил Васильевич*

Кафедра органической и биологической химии. Ивановский государственный университет,
Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (4923) 37-37-03. E-mail: tgvolkova@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: азометины, строение, прототропная таутомерия, конформационный анализ, реакционная способность, влияние растворителя.

Аннотация

В настоящей статье представлен обзор работ, выполненных на кафедре органической и биологической химии Ивановского государственного университета, посвященных изучению реакции образования азометинов, исследованию особенностей их строения и свойств. С помощью квантово-химических методов установлено, что азометины получают в две стадии, через образование промежуточного продукта – полуаминаля. Установлено, что учет эффекта растворителя в моделируемой системе приводит к понижению энергетического профиля реакции. Обсуждаются особенности строения азометинов, отличающихся природой и местоположением заместителей в бензольном кольце. Методом ЯМР спектроскопии доказано существование в растворе имин-енаминной таутомерии с преобладание енаминной формы, причем устойчивы оба таутомера. Конформационный анализ, выполненный для молекул ароматических азометинов при температурах существования разных фаз и фазовых переходов, показал, что фазовые переходы сопровождаются изменением конформации и длины молекулы, которое определяется возможностью вращения бензольных колец и подвижностью алкильных групп. Показано, что катализаторы на основе углеродных наноматериалов значительно активнее в гидрировании азометинов, по сравнению с аналогами на активированном угле. С использованием специализированных алгоритмов анализа мультипараметрических данных и отобранных молекулярных дескрипторов разработан ряд компьютерных моделей и проведено предсказание биохимической активности азометинов и полученных из них вторичных аминов.

Содержание

Введение

1. Особенности реакции образования оснований Шиффа
2. Строение молекул и прототропная таутомерия в жирноароматических азометинах
3. Строение и конформационное поведение ароматических азометинов
4. Жидкофазное каталитическое гидрирование азометинов в присутствии металлсодержащих углеродных наноматериалов
5. Предсказание мишень-специфичной активности азометинов и вторичных аминов