

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Регистрационный код публикации: 13-33-1-74 Подраздел: Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 54-386. Поступила в редакцию 4 февраля 2013 г.

Электронные спектры поглощения и строение 6-(2-метил-5-оксо-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-имидазол-4-илазо)-1-оксо-2,5-дигидро-1*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-с]пиримидин-7-карбоновой кислоты

© Ковальчукова^{1*+} Ольга Владимировна, Рябов¹ Михаил Алексеевич,
Аль Тахан^{1,2} Рана Абдулила Аббас, Зайцев^{1*} Борис Ефимович,
Страшнова¹ Светлана Болеславна и Волянский¹ Олег Вениаминович

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

² Кафедра химии. Технологический институт. г. Багдад. Ирак.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: электронная спектроскопия, квантово-химические расчеты, ППП, РМЗ, бензо[4,5]имидазо[1,2-с]хиназолин, производные.

Аннотация

Спектральными (электронная спектроскопия) и квантово-химическими (ППП, РМЗ) методами изучены таутомерные и ионные формы 6-(2-метил-5-оксо-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-имидазол-4-илазо)-1-оксо-2,5-дигидро-1*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-с]пиримидин-7-карбоновой кислоты. Показано его преимущественное существование в виде неплоского СН-азо таутомера.