

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/19-60-11-106 Подраздел: Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.022+ 541.65/654. Поступила в редакцию 22 ноября 2019 г.

Спектральное и квантово-химическое изучение таутомерных и ионных превращений 2-(2-(2-гидрокси-5-сульфанилфенил) гидразон)-3-оксо-*N*-фенилбутанамид

© Ву^{1,2,+} Тхи Нгок Ань, Рябов¹ Михаил Алексеевич,
Ковальчукова*^{1,3} Ольга Владимировна и Гусаров³ Дмитрий Сергеевич

¹ Кафедра общей химии. Российский университет дружбы народов.
ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. E-mail: vuanh0000@gmail.com

² Кафедра фармации. Буонматутский университет. ул. Ха Зуи Тап, 298.
Буон Ма Туот. Даклак, 630000. Вьетнам.

³ Кафедра органической химии. Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство). ул. Садовническая, д.33. стр.1.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, 2-арилгидразоно-1,3-дикарбонильные соединения, таутомерные, конформерные и ионные формы.

Аннотация

Методом DFT/B3LYP квантово-химического моделирования изучена стабильность таутомерных, конформерных и ионных форм 2-(2-(2-гидрокси-5-сульфанилфенил) гидразон)-3-оксо-*N*-фенилбутанамид (H_2L). Определены геометрическое, электронное строение и длины связей молекул в различных таутомерных формах. Показано, что устойчивость изолированных молекул H_2L определяется числом существующих межмолекулярных водородных связей, замыкающих шестичленный и пятичленный циклы. Предложены наиболее устойчивые таутомерные и конформерные формы органической молекулы и ее дианиона. Рассчитаны межатомные расстояния, углы, заряды на атомах, ИК и электронные спектры поглощения таутомерных форм молекулы и дианиона (H_2L и L^{2-}). В работе были изучены электронные спектры поглощения в водно-спиртовом растворе и установлено, что в щелочной среде молекула переходит в ионную форму с bathochromным сдвигом на 47 нм, соответствующим результатам TD-DFT расчета длинноволновой полосы в электронных спектрах поглощения при переходе от гидразотаутомеру (форма а) к дианиону (форма b²⁻) (смещение на 92 нм). Полученные расчетные результаты по расстоянию и углам между атомами хорошо согласуются с экспериментальными данными молекулы по рентгеноструктурному анализу. Показано, что ИК-спектр устойчивой формы характеризуется двумя полосами поглощения в области 1690 и 1655 cm^{-1} , которые относятся к валентным колебаниям карбонильных групп (C=O), связанных прочной внутримолекулярной водородной связью. ЯМР 1H спектры подтверждают, что наиболее устойчивой для нейтральной молекулы является гидразонная форма.