

Теоретическое изучение изомеризации 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона

© Гарифзянова Гюзель Габдульбаровна

Кафедра катализа. Казанский национальный исследовательский технологический университет.

ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru

Ключевые слова: квантово-химический расчет, 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинон, метод V3LYP, таутомер.

Аннотация

В данной работе приводятся результаты компьютерного моделирования таутомерных превращений молекулы 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона. Из литературы известно, что наличие заместителей в 1,4-положении антрахинона-9,10 приводит к различным таутомерным превращениям, при этом наблюдается сдвиг максимума поглощения и появление полос поглощения в красноволновой области в электронных спектрах. Как для описанного в литературе 1-амино-4-гидроксиантрахинона, так и для 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона характерны два вида прототропной таутомерии – кето-енольная и аминок-иминная. Квантово-химическое моделирование способствует к проведению расчетов относительных энергий таутомеров и изомеров, барьеров их взаимопревращений, а также нахождению их структурных параметров.

Целью данного исследования было изучение механизма образования таутомеров при переносе водорода в молекуле 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона, а также образования изомеров при миграции ОН-группы. Расчеты проводились с использованием программы Gaussian09. При изучении структуры таутомеров 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона использовался метод V3LYP с базисом def2TZV. Был проведен поиск переходных состояний при переносе водорода и миграции ОН-группы. Проводился расчет спусков по пути реакции для подтверждения того, что переходное состояние находится на пути нужной реакции. Были локализованы минимумы, которые соответствуют исходному веществу и продукту. Были рассчитаны энтальпии активации изучаемых реакций. Миграции ОН-группы в молекуле 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона приводит к образованию 4-фениламино-9-амино-1,10-антрахинона.

Как показывает расчет кето-форма 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона энергетически выгоднее всех изученных в данной работе изомеров, в том числе и енольной формы. Наименьшая разница в полных потенциальных энергиях составляет 23.7 кДж/моль между исходной кетонной формой 1-амино-4-фениламино-9,10-антрахинона и последней структурой превращений – молекулой 4-фениламино-9-амино-1,10-антрахинона.