

Детали механизма образования 5-(пиридилметилен)-3-алкил-2-тиогидантоинов

© Аль-Хазраджи¹ Ахмед Сухди Хади, Дудкин¹ Илья Юрьевич,
Коверда¹ Михаил Николаевич, Финько² Александр Валериевич,
Офицеров^{1*} Евгений Николаевич и Белоглазкина² Елена Кимовна

¹ Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru

² Кафедра органической химии. Химический факультет. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д. 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 2-тио-5-(пиридилметилен)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-оны, 3-алкил (арил- или гетероарил-)-2-тиоксо-имидазолидин-4-оны или 3-R-2-сульфанилидене-имидазолидин-4-оны или 3-R-2-тиоксоимидазолидин-4-оны или N-алкил(арил) тиогидантоины, а так же 2-тиогидантоины или 3-замещенные тиогидантоины; 3-алкил-2-тиоксоимидазолидин-4-оны и их S-замещенных (2-R-тиол-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-оны) квантовая химия, 5-Z-структура, механизм образования и дипольные моменты 2-тио-5-(пиридилметилен)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-онов, свободная энергия образования.

Аннотация

Рассмотрены особенности второй стадии реакции образования перспективного класса биологически активных соединений 2-тио-5-(пиридилметилен)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-онов, протекающей через образование реакционного комплекса из реагентов, катализатора (КОН) и сольватной оболочки из молекул растворителя и дан ответ на вопрос: «Является ли образование 5-Z ориентированного продукта так же и термодинамически лимитируемым?» С целью поиска ответа на этот вопрос были просчитаны энергии образования двух стереоизомеров и их поворотных конформеров 5-Z, а также тиоенольных форм, соответствующих соединениям 5-Z, дипольные моменты и моменты инерции вращательного движения J по осям x , y , z , методами квантовой химии. Проведенный в работе анализ полученных расчетных данных энергий образования альтернативных продуктов, моментов инерции вращательного движения и их последующее сравнение с результатами эксперимента свидетельствует, что образование Z-продукта является симбатным сочетанием, как ориентационных взаимодействий (диполь-дипольных, водородных связей) в реакционном комплексе, предшествующим переходному состоянию, так и термодинамической предпочтительностью образовавшегося продукта.

Полученные данные так же свидетельствуют и в пользу необходимости привлечения, наряду с традиционными энергиями образования структур, так же и моментов инерции вращательного движения J_x и J_z отдельных предполагаемых продуктов, которые оказывают, как и дипольные моменты, детерминирующую роль на положение конформационного равновесия и стабилизацию отдельных форм, приводящих к образованию Z-5-(пиридилметилен)-структуры. Это подтверждает ранее сделанный вывод о том, что моменты инерции вращательного движения J_x и J_z как характеристики вращательной степени свободы, могут выступать в качестве численных характеристик пространственной структуры молекул.