

## Особенности электронного строения ряда 5-пиридилметилентиогидантоинов и их S-алкилированных производных по данным ИК-спектроскопии

© Аль-Хазраджи<sup>1</sup> Ахмед Сухди Хади, Дудкин<sup>1</sup> Илья Юрьевич,  
Финько<sup>2</sup> Александр Валериевич, Белоглазкина<sup>2\*</sup> Елена Кимовна,  
Офицеров<sup>1+</sup> Евгений Николаевич

<sup>1</sup> 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.: +7 (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru

<sup>2</sup> Кафедра органической химии. Химический факультет. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. г. Москва. Россия.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** электронное строение, 2-тио-5-(пиридилметилене)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-оны, 3-алкил (арил- или гетероарил-)-2-тиоксо-имидазолидин-4-оны, 3-R-2-сульфанилидене-имидазолидин-4-оны, 3-R-2-тиоксоимидазолидин-4-оны, N-алкил(арил) тиогидантоины, 2-тиогидантоины, 3-замещенные тиогидантоины; 3-алкил-2-тиоксоимидазолидин-4-оны, S-замещенные (2-R-тиол-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-оны), квантовая химия, ИК-спектры 2-тио-5-(пиридилметилене)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-онов, фельд-эффект.

### Аннотация

Рассмотрены особенности электронной структуры биологически активных 2-тио-5-(пиридилметилене)-3,5-дигидро-4Н-имидазол-4-онов, образование которых протекает через промежуточные реакционные комплексы из реагентов, катализатора (KOH) и сольватной оболочки из молекул растворителя. Особенностью ИК-спектров всех полученных тиогидантоинов и их S-алкилированных форм является высокая частота валентных колебаний амидной карбонильной группы, составляющая 1720-1740 см<sup>-1</sup>. Дан ответ на вопрос: «Является ли такая высокая частота валентных колебаний следствием электронных эффектов и какого типа?» С целью поиска ответа на этот вопрос были просчитаны энергии образования двух продуктов – исходного тиогидантоина и его алкилированной формы и их ИК-спектры.

Анализ полученных данных и их сравнение с результатами эксперимента свидетельствует, что образование циклических производных амидов карбоновых кислот (лактамов), имеющих сопряженную карбонильную группу, приводит к увеличению частоты валентных колебаний карбонильной группы, особенно при наличии напротив карбонильной группы кратной связи – от 1660-1690 до 1740 см<sup>-1</sup>, что свидетельствует о характерном пространственно ориентированном фельд-эффекте.

В полученных в работе спектрах тиогидантоинов и их производных, в том числе комплексах с металлами, а также в экспериментально измеренных спектрах никотинамида и пиридина, наблюдаются колебания, практически точно совпадающие по частоте (704±/2 см<sup>-1</sup>). Эти частоты соответствуют деформационным колебаниям C-H-связей относительно плоскости пиридинового кольца в приведенных молекулах производных тиогидантоинов, никотинамида и пиридина и их предложено использовать в качестве репера при идентификации пиридинового цикла в многочисленных производных 2-метиленипиридилтиогидантоинов.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Аль-Хазраджи Ахмед Сухди Хади, Дудкин И.Ю., Финько А.В., Белоглазкина Е.К., Офицеров Е.Н. Особенности электронного строения ряда 5-пиридилметилентиогидантоинов и их S-алкилированных производных по данным ИК-спектроскопии. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.71. №9. С.143-155. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-9-143

или

Al-Khazraji Ahmed Suhdee Hadi, Ilya Yu. Dudkin, Alexander V. Finko, Elena K. Beloglazkina, Evgeny N. Ofitserov. Features of the electronic structure of a number of 5-pyridylenethiohydantoins and their S-alkylderivatives according to IR spectroscopy. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.71. No.9. P.143-155. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-9-143. (Russian)