

Силовые поля в координатах X_8^0 и ИК-спектры молекул 4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5- диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 и 4-[(3-метокси-4- гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3

© Воронков Валерий Александрович, Белик*⁺ Александр Васильевич

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный
университет. ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: +7 (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: обобщенные силовые коэффициенты, координаты X_8^0 , расчеты DFT, колебательный спектр, молекулы (*E*)-4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 и (*E*)-4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3.

Аннотация

В настоящей работе в рамках идеологии теории функционала плотности (в англоязычной литературе известной, как DFT – *Density Functional Theory*) с использованием гибридного функционала B3LYP/6-311++g(3d2f,3p2d) проведены расчеты молекул 4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 и 4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3. Данные соединения можно рассматривать в качестве оснований Шиффа, интерес к которым в последнее время значительно возрос как у химиков, так и у биологов. Это обусловлено их химической природой и биологической активностью. Основная цель исследования состояла в оценке влияния химического строения соединения на его ИК-спектр через особенности поведения матрицы силовых коэффициентов в квазигармоническом приближении. По известным причинам такой анализ сложно осуществить в декартовой системе координат. Согласно исследованиям профессора Л.С. Маянца и Г.Б. Шалтупера корректный расчет можно осуществить в координатах X_8^0 . Для этого нужно выбрать линейно независимый набор векторов связей для рассматриваемой молекулы, где каждый вектор определен в своей собственной системе координат. Обычно такие вектора совмещены с валентными связями объекта. Квантово-химические расчеты позволяют получить вторые производные полной энергии по соответствующим координатам. Далее, если просуммировать их составляющие по осям x , y , z для каждого вектора связи, то получим для него одно число, названное обобщенным силовым коэффициентом связи. Фактически можно получить аналог силового коэффициента химической связи, которым химики пользовались ранее в спектроскопии, используя, так называемые, естественные или химические координаты. Сравнивая силовые коэффициенты связей двух исследуемых молекул, которые отличаются друг от друга только наличием или отсутствием двух метильных групп в пятичленном цикле, отмечается существенное изменение обобщенного силового коэффициента связи ($RR'C=N$)- R'' (на 0.1188 $\text{mdyn}/\text{Å}$ в координатах X_8^0). Расчеты частот и форм нормальных колебаний проведены как в декартовой системе координат, так и в X_8^0 путем решения системы уравнений, матричный вид которых $GFL = LA$. Результаты расчетов были идентичны, что указывает на корректность проведенных преобразований. Получены ИК-спектры соединений. Показаны существенные изменения в интенсивностях полос. В частности, отмечено, что наиболее интенсивные полосы в спектре 4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 имеют значения 1276 cm^{-1} (симметричные валентные колебания связей $\text{CH}_3\text{O}-\text{C}$ и $\text{HO}-\text{C}$, а так же связей $\text{C}-\text{C}$ и $\text{CH}_3\text{C}-\text{NCH}_3$ пятичленного цикла) и 1655 cm^{-1} (асимметричные валентные колебания $\text{C}=\text{O}$ пятичленного цикла и $\text{C}=\text{N}$). Наиболее интенсивные полосы в спектре 4-[(3-метокси-4-гидроксibenзилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 имеют значения 1187 cm^{-1} (валентное колебание связи $\text{CH}_3\text{O}-\text{C}$ и деформационное $\angle\text{НОС}$ гидроксильной группы) и 1352 cm^{-1} (валентное колебание связи $\text{N}-\text{C}$ азота пятичленного цикла с углеродом шестичленного цикла и внутрициклические валентные и деформационные колебания в пятичленном цикле).

Полная исследовательская публикация _____ Воронков В.А., Белик А.В.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Воронков В.А., Белик А.В. Силовые поля в координатах X_{δ}° и ИК-спектры молекул 4-[(3-метокси-4-гидроксибензилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 и 4-[(3-метокси-4-гидроксибензилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3. *Бутлеровские сообщения*. **2023**. Т.74. №6. С.53-62. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-6-53

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Воронков В.А., Белик А.В. Силовые поля в координатах X_{δ}° и ИК-спектры молекул 4-[(3-метокси-4-гидроксибензилиден)амино]-1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3*H*-пиразолон-3 и 4-[(3-метокси-4-гидроксибензилиден)амино]-1,2-дигидро-2-фенил-3*H*-пиразолон-3. *Бутлеровские сообщения В*. **2023**. Vol.5. No.2. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RB/23-5-2-11.