

Теоретическое моделирование реакций образования *аци*-формы или нитрита в мезо-мононитрозамещенном дифенилпорфирине

© Гарифзянова*+ Гюзель Габдульбаровна

Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.

Казанский национальный исследовательский технологический университет.

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

Тел.: +7 (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: мезо-мононитрозамещенный дифенилпорфирин, образование *аци*-формы, нитро-нитритная перегруппировка, радикальный распад, квантово-химический расчет, DFT, метод V3LYP.

Аннотация

Возможность замещать в синтезированных нитрофенилпорфинах нитрогруппу на аминогруппу вызывает исследовательский интерес, так как в дальнейшем можно получать различные по структуре комплексы из меди, марганца. В данной работе выполнены квантово-химические расчеты структур мезо-нитрозамещенных 5,15-дифенил-3,7,13,17-тетраметил-2,8,12,18-тетраэтилпорфинов, которые получают нитрованием дифенилпорфирина. Функционал V3LYP использовался для расчёта структуры самих молекул мезо-нитропорфиринов, колебательных спектров, а также переходных состояний с их участием, так как этот функционал плотности эффективен и обеспечивает отличный компромисс между химической точностью и затратами на вычисления. Проведенный расчет полной электронной энергии структур *цис*- и *транс*-изомеров дифенилпорфиринов показал, что относительная электронная энергия у них отличается на 0.05-0.2 кДж/моль, что значительно меньше ошибки вычислений.

Были рассмотрены три пути изменения структуры мезо-мононитрозамещенного дифенилпорфирина: радикальный распад молекулы, нитро-нитритная перегруппировка и образование *аци*-формы. Проведено сравнение их энтальпий активации. Энтальпия активации нитро-нитритной перегруппировки в мезо-мононитрозамещенном дифенилпорфирине составила 221.78 кДж/моль. Энергия диссоциации радикального распада данного соединения оказалась на 25.84 кДж/моль меньше. Самым выгодным из этих трех реакций стало образование *аци*-формы в мезо-мононитрозамещенном дифенилпорфирине – энтальпия активации составила 155.89 кДж/моль. Расчёты проводились методом V3LYP/6-31G(d,p) в газовой фазе.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Гарифзянова Г.Г. Теоретическое моделирование реакций образования *аци*-формы или нитрита в мезо-мононитрозамещенном дифенилпорфирине. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.80. №10. С.139-145.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-10-139

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Гарифзянова Г.Г. Теоретическое моделирование реакций образования *аци*-формы или нитрита в мезо-мононитрозамещенном дифенилпорфирине. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.9. №4. Id.13.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-10-139/ROI-jbc-RA/24-9-4-13

The output for citing the English online version of the article:

Guzel G. Garifzianova. Theoretical modeling of reactions of *aci*-form or nitrite formation in *meso*-mononitrosubstituted diphenylporphyrin. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.9. No.4. Id.13.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-10-139/ROI-jbc-A/24-9-4-13