

ХІМІЧНІ НАУКИ

Пилипенко О.О.

аспірант,

Науковий керівник: Оковитий С.І.

доктор хімічних наук, професор, ректор,

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ

3-(ПІРОЛ-2-ІЛ)-5-(2-АМІНОФЕНІЛ)-1,2,4-ТІАДІАЗОЛУ

Гетероциклічні сполуки тіадіазолового ряду активно досліджуються на предмет застосування у різних галузях промисловості і органічному синтезі. Важливим етапом у дослідженні є структурний аналіз гетероциклів, які можуть існувати у вигляді різних таутомерів і конформерів. Нами проведено квантово-хімічний розрахунок структури та енергетичних характеристик 3-(пірол-2-іл)-5-(2-амінофеніл)-1,2,4-тіадіазолу методом теорії функціонала густини у наближенні SMD/M06-2X/6-311++G(d,p) за допомогою програми Gaussian 09. Дана сполука має три таутомери (**A**, **B**, **C**), кожен з яких може існувати у вигляді чотирьох конформерів (**c1-c4**), структуру яких наведено на рис. 1. Розраховані відносні вільні енергії Гіббса та заселеність змодельованих структур подано у табл. 1, розраховані електронні спектри наведені на рис. 2. Аналіз одержаних даних свідчить про переважне існування сполуки 3-(пірол-2-іл)-5-(2-амінофеніл)-1,2,4-тіадіазолу у вигляді таутомерів **A** і **B**. Причому таутомер **A** має найбільшу заселеність у випадку конформерів **c1** і **c2**, а таутомер **B** – у випадку конформерів **c2** і **c4**. В УФ-спектрі таутомер **A** має найбільш короткохвильовий максимум, а таутомер **C** – найбільш довгохвильовий максимум для всіх конформерів (**c1-c4**). Таким чином, електронна спектроскопія може бути рекомендована для встановлення структури тіадіазолів.

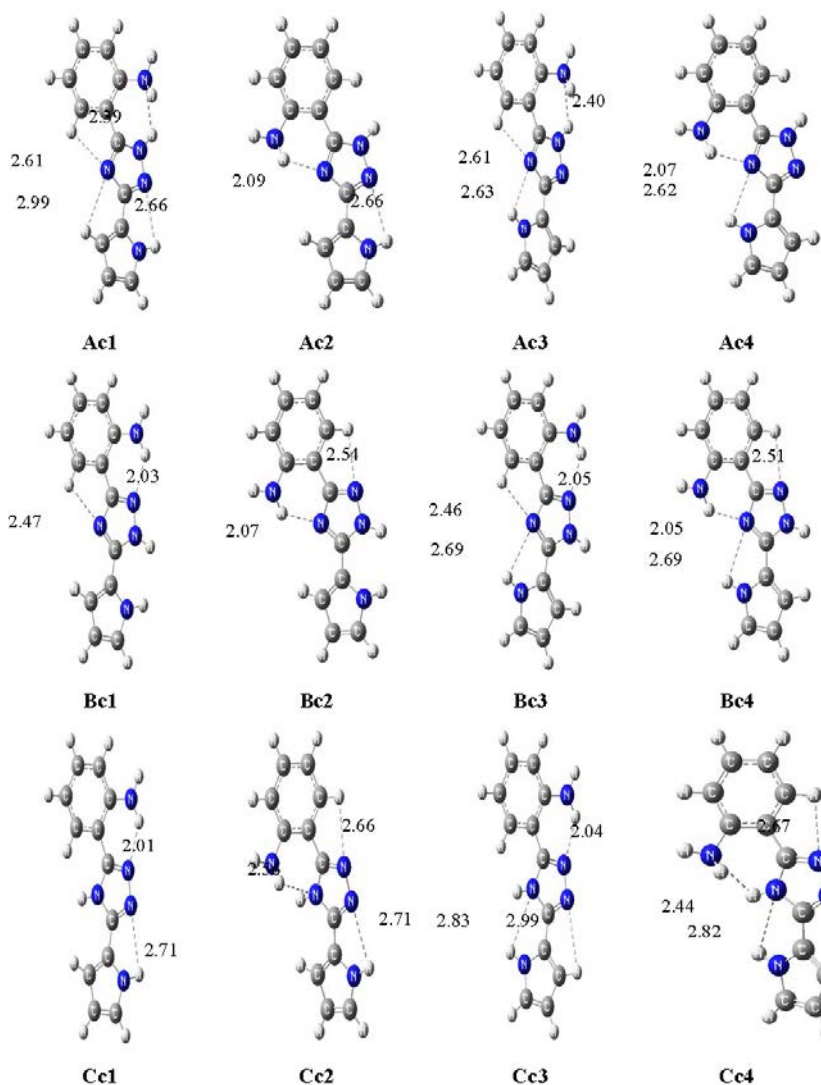


Рис. 1. Структури конформерів 3-(пірол-2-іл)-5-(2-амінофеніл)-1,2,4-тіадіазолу, оптимізовані у наближенні SMD/M06-2X/6-311++G(d,p) у метанолі. Довжини водневих зв'язків у Ангстремах

Джерело: розроблено авторами

Таблиця 1

**Відносна енергія і заселеність конформерів 3-(пірол-2-іл)-
5-(2-амінофеніл)-1,2,4-гіадіазолу**

Конформер	Ac1	Bc1	Cc1	Ac2	Bc2	Cc2	Ac3	Bc3	Cc3	Ac4	Bc4	Cc4
Відносна енергія, ккал/моль	0,49	2,06	4,26	0,68	0,61	5,95	2,32	2,32	1,67	2,09	0,00	4,91
Відносна заселеність конформерів, %	19,28	1,37	0,03	13,93	15,71	0,00	0,88	0,88	2,63	1,29	43,99	0,01

Джерело: розроблено авторами

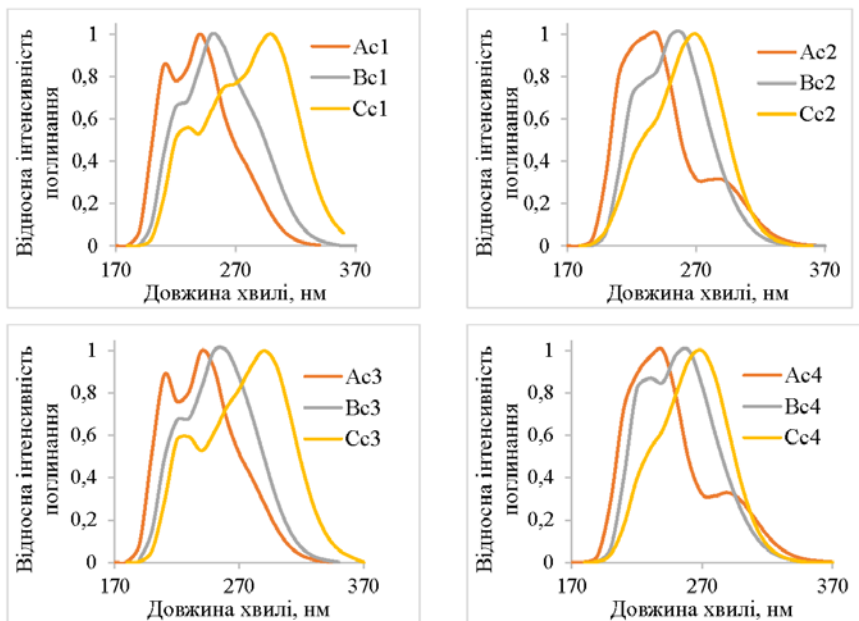


Рис. 2. Змодельовані у наближенні SMD/M06-2X/6-311++G(d,p) спектри конформерів 3-(пірол-2-іл)-5-(2-амінофеніл)-1,2,4-гіадіазолу у метанолі

Джерело: розроблено авторами