

выделен осадок белого цвета, установление структуры которого осуществляли с использованием  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопии.

Наличие функциональных групп в структу-

ре йодтримезиновой кислоты позволит в дальнейшем получать соединения поливалентного йода и использовать их в качестве прекурсоров для создания MOFs.

### Список литературы

1. Yaghi O.M., Li H., Davis C., Richardson D., Groy T.L. *Synthetic strategies, structure patterns, and emerging properties in the chemistry of modular porous solids // Accounts of Chemical Research, 1998. – Vol. 31. – №8. – P.474–484.*
2. Ferey G. *Hybrid porous solids: past, present, future // Chem. Soc. Rev., 2008. – Vol. 37. – P.191–214.*
3. Юсубов М.С., Функ Т.В., Гильмханова М.П., Жолобова Г.А., Дрыгунова Л.А., Юсубова Р.Я. *Синтез и применение соединений поливалентного иода. // Материал всероссийской научной конференции «Современные проблемы органической химии», Новосибирск, 5–9 июня, 2007.*
4. *Химическая энциклопедия. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – Т.1. – С. 269.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ N-АЛКЕНИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Е.С. Казанцева

Научный руководитель – д.х.н., профессор А.И. Хлебников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, esk38@tpu.ru

В настоящее время имеются многочисленные экспериментальные данные о кинетике кислотного гидролиза енаминов. Однако, недостаточно изученным остается влияние различных факторов (влияние стерических сопряжений, энергии ограниченных орбиталей, заряда на  $\beta$ -углероде, устойчивости образующегося корбений-иммониевого иона) на реакционную способность енаминов.

В енаминах имеет место  $n, p$ -сопряжение между электронной парой атома азота и олефиновой связью. В результате возникает повышенная электродная плотность на  $\beta$ -углероде, который таким образом, является электронным центром при атаке электрофилов. Взаимодействие енаминов с электрофилами обычно изучают на модельной реакции кислотного гидролиза, в которой в качестве электрофила выступает протон (схема 1).

В нашей работе исследованы N-алкенильные производные азотсодержащих гетероциклов: карбазола, феноксазина и фенотиазина (схема 2) [1, 2]. В каждом ряду было изучено N-винилпроизводное, а также соединения, в которых один из радикалов  $R^1$ ,  $R^2$  или  $R^3$  представлял собой метильную либо фенильную группы.

Нами были проведены квантово-химиче-

ские расчеты высокого уровня методом теории функционала плотности с применением пакета программ GAUSSIAN [3, 4]. Для расчетов был использован базис B3LYB/6-31+G(d,p).

Выполнена оптимизация геометрии N-алкенильных производных карбазола, фенотиазина и феноксазина в вакууме. Кроме того, сделаны расчеты для соответствующих корбений-иммониевых ионов, образующихся в лимитирующей стадии  $\beta$ -протонирования олефиновой связи в модельной реакции кислотного гидролиза. Проанализированы геометрические параметры молекул (угол между олефиновым фрагментом и гетероциклом), оценены величины энтропии и энергии Гиббса, энергии ограниченных орбиталей (ВЗМО и НСМО).

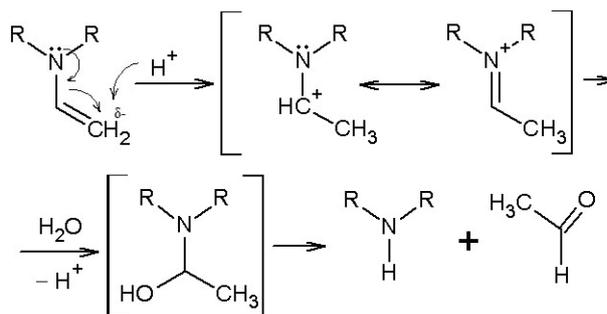


Схема 1.

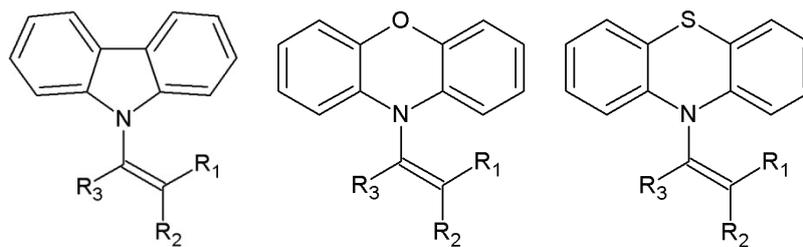


Схема 2.

Выводы:

1. Выполнены квантово-химические расчеты высокого уровня методом DFT для ряда N-алкенильных производных карбазола, фенотиазона и феноксазина в вакууме.
2. Получены характеристики электронного и пространственного строения молекул, которые могут быть использованы для построения коли-

чественных моделей «структура – реакционная способность».

3. Установлено, что в молекулах цис-изомеров и  $\alpha$ -замещенных производных имеют место значительные стерические взаимодействия между гетероциклом и олефиновым фрагментом, приводящие к нарушению p,p-сопряжения.

### Список литературы

1. Анфиногенов В.А., Охтеменко И.Н., Хлебников А.И., Филимонов В.Д. // *Ж. орган. химии*, 1997. – Т.33. – №7. – С.10597–1102.
2. Анфиногенов В.А., Хлебников А.И., Филимонов В.Д., Огородников В.Д. // *Ж. орган. химии*, 1999. – Т.35. – №3. – С.481–488.
3. Foresman James V. *Exploring Chemistry with electronic structure methods*. Gaussian, Inc., 1996. – 302p.
4. Серба П.В., Мирошниченко С.П., Блинов Ю.Ф. *Квантово-химические расчеты в программе GAUSSIAN по курсу «Физика низкоразмерных структур»*. – Таганрог: ТТИ ЮФУ, 2012. – 100с.

## СИНТЕЗ МУЛЬТИТОПНЫХ ЛИГАНДОВ – ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-1-ИЛМЕТИЛАМИНА

М.А. Ключенко

Научный руководитель – д.х.н., профессор А.С. Потапов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, klyuchenkomaksim@mail.ru

Соединения, содержащие два и более триазольных кольца, соединенные алифатическим линкером, могут выступать в качестве хелатирующего лиганда в координационных соединениях различной структуры. Так как данные структуры могут образовывать хелатные комплексы с ионами большинства переходных металлов [1], их можно использовать в качестве сенсоров [2] и строительных блоков для металлорганических

каркасов [3], известные в литературе как MOFs [4]. Введение в алифатический линкер дополнительных донорных атомов, таких как азот, способствует увеличению хелатирующей способности лиганда.

Целью данной работы является получение новых хелатирующих лигандов на основе 1,2,4-триазола. В качестве линкера нами были применены производные диметиланилина (6–9).

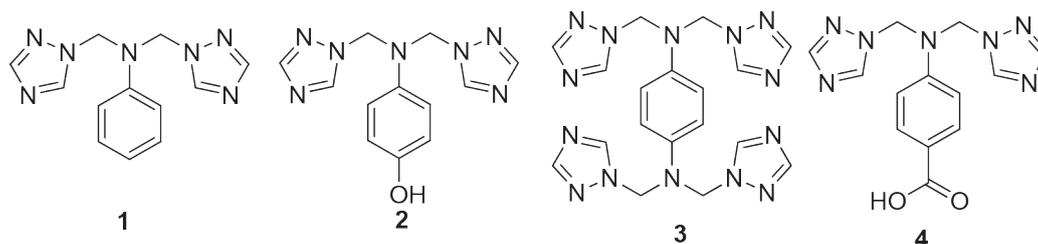


Рис. 1. Битопные лиганды производные бис((1H-триазол-1-ил)метил)анилина