

КОМПЛЕКСНЕ КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ТА СПЕКТРАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТАУТОМЕРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДЕЯКИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ СПОЛУК

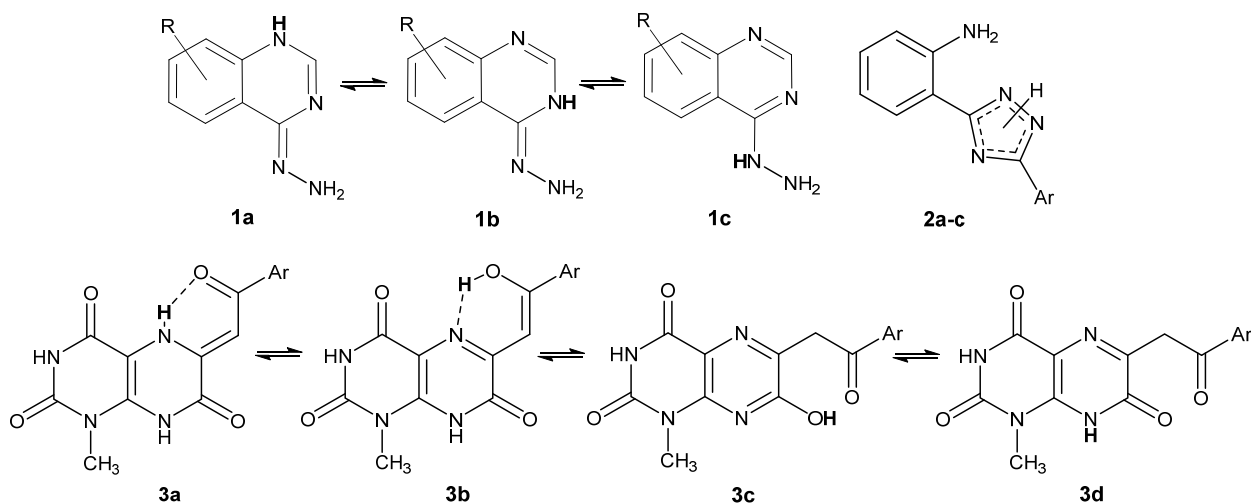
Оковитий С.І.¹, Сергєєва Т.Ю.¹, Холодняк С.В.², Воскобойнік О.Ю.², Коваленко С.І.²

¹ Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара, просп. Гагаріна,
72, Дніпропетровськ sokoxyty@icnanotox.org

² Запорізький державний медичний університет, просп. Маяковського, 26, Запоріжжя
kovalenkosergiy@gmail.com

Однією з основних проблем органічної хімії є дослідження таутомерних та конформаційних властивостей сполук. Як правило, при цьому використовується комплекс спектральних методів, але в деяких випадках аналіз лише експериментальних спектрів не дозволяє дійти однозначного висновку щодо структури. В цьому контексті квантово-хімічні розрахунки відкривають принципово нові можливості.

Дана робота присвячена комплексному вивченню таутомерії гетероциклічних сполук 1-3.



На першому етапі проводилась оптимізація геометрії та розрахунок термодинамічних характеристик всіх можливих таутомерів та конформерів. Для найбільш вигідних форм моделювались ЯМР-, ІЧ- та УФ спектри. Побудовані з врахуванням заселеності «теоретичні» спекти, порівнювались з експериментальними, що дозволило провести віднесення відповідних смуг і сигналів та встановити основні рівноважні форми молекул 1-3.

Аналогічна методика може бути застосована для дослідження таутомерних властивостей різних класів органічних сполук.