

УДК 547.022, 544.163.3, 544.183

Рассохина Карина Андреевна,
магистрант, Алтайский государственный университет, e-mail: karinarassohina17@gmail.com
Безносюк Сергей Александрович,
д.ф.-м.н., профессор, Алтайский государственный университет, e-mail: bsa1953@mail.ru
Никольский Сергей Николаевич,
д.х.н., профессор, Карагандинский университет имени академика Е.А. Букетова, Казахстан,
e-mail: sergeynikolsky@mail.ru

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ И ЭПР-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
СТРОЕНИЯ И ПРОТОЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АЗИРИДИНА**

Rassokhina K.A, Beznosyuk S.A, Nikolsky S.N.

**QUANTUM CHEMICAL AND EPR SPECTROSCOPIC STUDIES OF THE
STRUCTURE AND PROTOLYTIC PROPERTIES OF SOME AZIRIDINE DERIVATIVES**

Аннотация: Рассмотрены методы квантовой химии для расчёта спектров электронного парамагнитного резонанса производных азиридина, физических свойств молекул в случае протонного переноса в различных средах.

Ключевые слова: ЭПР-спектроскопия, методы теории функционала плотности, реакция протонного обмена.

Abstract: The methods of quantum chemistry for calculating the spectra of electron paramagnetic resonance of aziridine derivatives and the physical properties of molecules in the case of proton transfer in various media are considered.

Keywords: EPR spectroscopy, density functional theory methods, proton exchange reaction.

Среди множества органических соединений азиридины занимают особое место благодаря своим уникальным химическим и физическим свойствам [1]. Они находят применение в синтезе сложных органических молекул, биологически активных веществ, а также материалов с особыми функциональными характеристиками. Многие производные азиридина – практически важные вещества с широким спектром применения в медицине, сельском хозяйстве, в качестве антиоксидантов, органических полупроводников, фотоактивных материалов, добавок к топливу и маслам, консервантов, технических и пищевых красителей, ингибиторов коррозии. Особый интерес вызывают протолитические свойства производных азиридина, которые играют ключевую роль в их химическом поведении. Протолитические свойства соединений – это ключ к пониманию их химического поведения и роли в реакциях. Азиридин обладает уникальными протолитическими характеристиками, обусловленными его структурой и наличием азота как гетероатома. Это делает его удобным для анализа и изучения в рамках современного органического синтеза.

Квантовая химия сегодня – это не просто инструмент для анализа молекулярного строения, но и ключ к пониманию сложнейших процессов, происходящих

на атомарном и молекулярном уровнях. С её помощью можно «взглянуть» на электронные переходы, анализировать природу химической связи, а также изучать реакционную способность молекул. Методы квантовой химии и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) предоставляют мощный инструментальный арсенал для исследования этих вопросов. Квантово-химические расчеты позволяют моделировать электронную плотность, вычислять энергетические уровни и выявлять механизмы реакций с высокой точностью. ЭПР-спектроскопия, в свою очередь, является незаменимым методом изучения свойств парамагнитных центров, давая уникальную информацию о тонкой структуре и магнитных взаимодействиях.

Среди различных методов исследований наиболее популярны полуэмпирические методы квантовой химии. Для точного расчетного сканирования профиля поверхности потенциальной энергии (ППЭ) использована программа Gaussian16W, процедура SCAN, которая представляет собой расчет полной энергии системы как функции изменения нескольких геометрических параметров: длины связи, валентных или двугранных углов. Для изучения реакции протонного обмена с помощью ЭПР-спектроскопии использовали установленный кислотный спиновой зонд на основе стабильного семихинонового радикала 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксила. В таблице приведены параметры ППЭ переноса протона из исходного состояния на зонде, через переходный комплекс, к конечному состоянию на 1,2,3-триметилдиазирidine, полученные путем полной оптимизации геометрии исходных, промежуточных и конечных комплексов реакции протонного обмена.

Таблица

Параметры ППЭ переноса протона от 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксила к 1,2,3-триметилдиазирidine

Положение протона	Энергия, Хартри
Исходное	-952,91
Переходное	-952,87
Конечное	-952,86

Анализ данных, полученных полуэмпирическим методом, позволяет предсказать существование различий в большинстве геометрических параметров исследуемых молекул. Полученные параметры реакции протонного обмена 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксила для всех производных азиридина показывают, что они существенно зависят от наличия и типа заместителя в молекуле. Квантово-химические методы позволяют моделировать электронную структуру молекул и прогнозировать их поведение в различных средах, что также может предсказать физические свойства молекулы в системе протонного переноса.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Джилкрист, Т.** Химия гетероциклических соединений. Учебник для вузов. Пер. с англ. – М.: Мир, 1996. – 464 с.