

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ
ДИФОРМИЛГИДРАЗИНА С *p*-АМИНОФЕНОЛОМ**

Chirkina E.A.

**QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE MECHANISM OF REACTION
OF DIFORMYLHYDRAZINE WITH *p*-AMINOPHENOL**

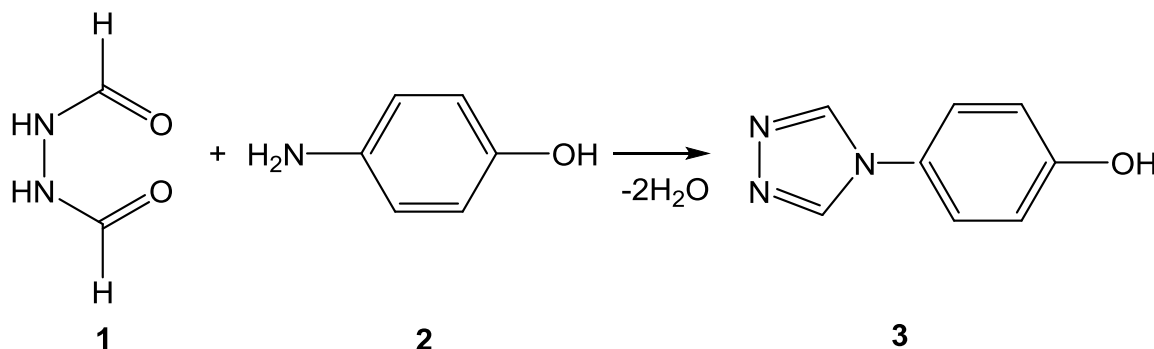
Аннотация. По результатам квантово-химического изучения в рамках теории функционала электронной плотности методом B3LYP/6-311++G (d, p) предложен теоретический механизм реакции диформилгидразина с *p*-аминофенолом.

Ключевые слова: диформилгидразин, аминофенолы, механизм реакции, нуклеофильное замещение, теория функционала электронной плотности, B3LYP, поверхность потенциальной энергии.

Abstract. Based on the results of a quantum chemical study within the framework of the electron density functional theory by the B3LYP/6-311++G(d, p) method, a theoretical mechanism for the reaction of diformylhydrazine with *p*-aminophenol is proposed.

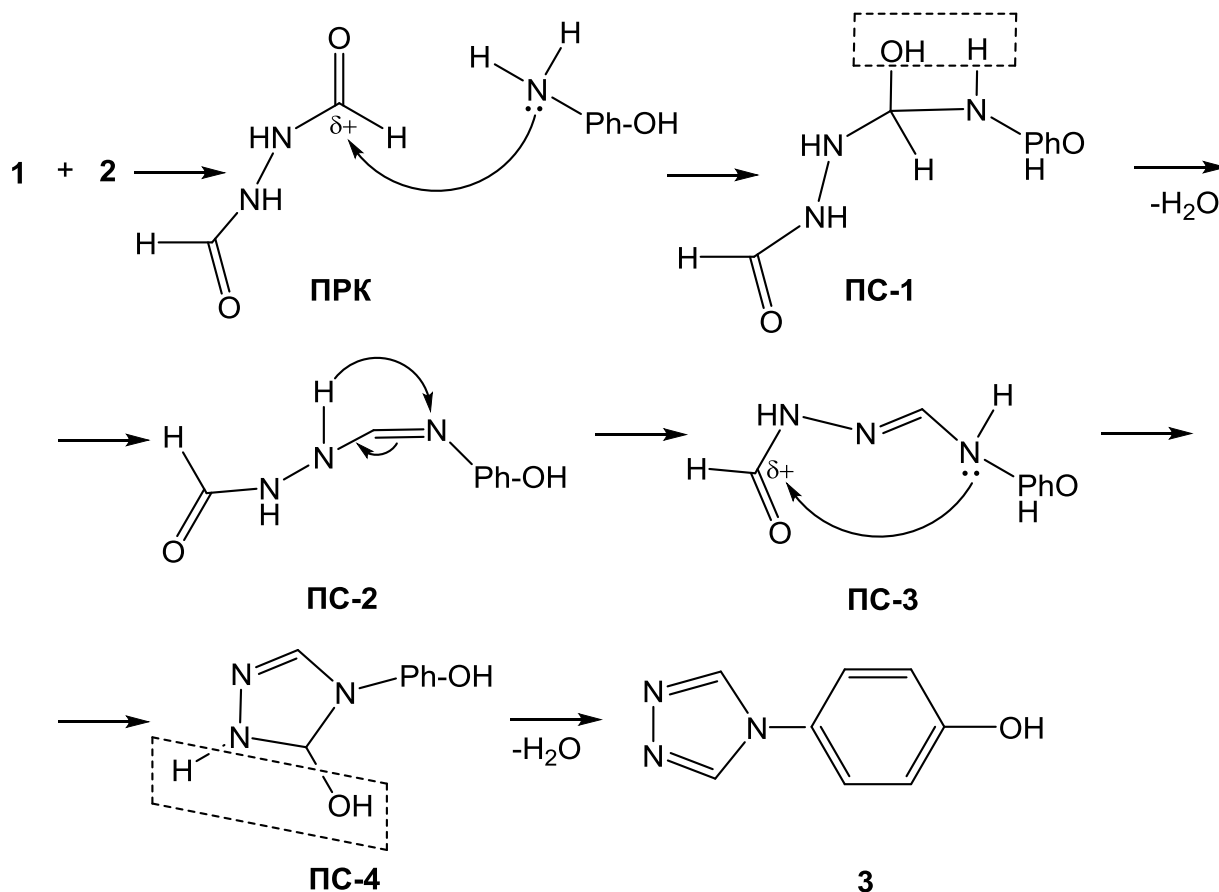
Keywords: diformylhydrazine, aminophenols, reaction mechanism, nucleophilic substitution, electron density functional theory, B3LYP, potential energy surface.

Целью настоящей работы явилось квантово-химическое изучение взаимодействия диформилгидразина **1** с *p*-аминофенолом **2**, приводящее к образованию 4-(*p*-гидроксифенил)-1,2,4-триазола [1]:



Оптимизацию геометрии всех локализованных стационарных точек и гармонический колебательный анализ проводили в программном пакете GAUSSIAN 09 в рамках теории функционала электронной плотности методом B3LYP/6-311++G (d, p).

Анализ полученных расчетных данных позволил предложить следующий теоретический механизм взаимодействия диформилгидразина **1** с *p*-аминофенолом **2**:



Реакция начинается с образования предреакционного комплекса **ПРК**, в котором аминогруппа пара-аминофенола **2** располагается напротив одной из карбонильных групп диформилгидразина **1** для последующей нуклеофильной атаки. На первой стадии образуется неустойчивый геминальный аминоспирт **ПС-1**, который далее дегидратируется до имина **ПС-2**. В полученном интермедиате **ПС-2** происходит прототропная амино-иминная перегруппировка и формируется полупродукт **ПС-3**. В результате нуклеофильной атаки атома азота аминофенольного фрагмента по второй карбонильной группе диформилгидразина образуется циклический аминоспирт **ПС-4**, при дальнейшей дегидратации которого формируется конечный 4-(п-гидроксифенил)-1,2,4-триазол **3**.

ЛИТЕРАТУРА

1. Елохина В.Н., Нахманович А.С., Ярошенко Т.И., Степанова З.В., Ларина Л.И. Синтез 4-гидроксифенил-1,2,4-триазолов // ЖОХ. 2006. Т. 76. Вып. 1. Р. 161-163.