РАЗДЕЛ IV. ХИМИЯ

Куликов М.А.

Особенности геометрического и электронного строения 2,4-динитрофенилгидразонов бензальацетона и дибензальацетона

ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», Березниковский филиал
(Россия, Березники)

doi:10.18411/sciencepublic-12-10-2019-07

idsp: sciencepublic-12-10-2019-07

Аннотация

В работе приводятся результаты квантово-химических расчетов молекул 2,4-динитрофенилгидразонов бензальацетона и дибензальацетона. Расчеты выполнены с использованием полуэмпирических методов. Построенные 3D модели показали существенные отличия в геометрическом строении молекул. Показана неравномерность распределения электронной плотности в молекулах исследованных соединений.

Ключевые слова: 2,4-динитрофенилгидразон бензальацетона, 2,4-динитрофенилгидразон дибензальацетона, квантово-химические расчеты, геометрическое строение, электронное строение.

Abstract

The paper presents the results of quantum-chemical calculations of the molecules of 2,4-dinitrophenylhydrazones of benzalacetone and dibenzalacetone. The calculations were performed using semiempirical methods. The constructed 3D models showed significant differences in the geometric structure of the molecules. The uneven distribution of electron density in the molecules of the studied compounds is shown.

Keywords: 2,4-dinitrophenylhydrazone of benzalacetone, 2,4-dinitrophenylhydrazone of dibenzalacetone, quantum-chemical calculations, geometric structure, electronic structure.

Бензальацетон (I) и дибензальацетон (II) обладают набором ценных свойств, что позволяет использовать их в медицине, при получении оптических материалов, ароматизаторов и других важных продуктов [1-5].

Получают данные соединения по реакции Кляйзена-Шмидта взаимодействием бензальдегида с ацетоном в щелочном водно-спиртовом растворе [6]. Соединения (I) и (II) относятся к классу кетонов и вступают в характерные для них реакции. Одной из таких реакций является образование 2,4-динитрофенилгидразонов.

Цель представленной работы состоит в изучении особенностей геометрического и электронного строения 2,4-динитрофенилгидразонов бензальацетона и дибензальацетона по результатам квантово-химических расчетов, выполненных с помощью полуэмпирических методов. Объекты исследования – соединения (III) и (IV).

На рисунке 1 представлены 3D модель и распределение электронной плотности в молекуле (III). Данные показывают, что строение молекулы (III) приближается к плоскостному. Распределение электронной плотности выражено неравномерно, наиболее насыщен участок молекулы, затрагивающий фрагмент 2,4-динитрофенилгидразина и боковую цепь.

Рисунок 1 – Графическая интерпретация результатов расчета молекулы (III)

Геометрическое строение молекулы (IV) существенно отличается от строения молекулы (III) (рис. 2). Присоединение еще одного бензольного кольца придает молекуле разветвленное пространственное строение за счет вращения бензольных фрагментов относительно плоскости боковой цепи, вызванного стерическими факторами. Распределение электронной плотности в молекуле (IV) показывает, что один стирильный радикал практически исключен из общей энергетической системы молекулы.

Рисунок 2 – Графическая интерпретация результатов расчета молекулы (IV)

Таким образом, проведенные квантово-химические расчеты показали существенное различие в геометрическом и электронном строении молекул 2,4-динитрофенилгидразонов бензальацетона и дибензальацетона. Полученные результаты могут быть использованы для изучения особенностей строения других соединений, родственных рассмотренным.

1. P.-C. Kuo, C.-Y. Cherng, J.-F. Jeng, A.G. Damu, C.-M. Teng, E.-J. Lee, T.-S. Wu Isolation of a Natural Antioxidant, Dehydrozingerone from *Zingiber officinale* and Synthesis of Its Analogues for Recognition of Effective Antioxidant and Antityrosinase Agents // *Arch. Pharm. Res.* 2005. Vol.28. № 5. P.518-528.
2. Singh N., Chauhan I.S. MicroRNA expression profiling of dibenzalacetone (DBA) treated intracellular a mastigotes of *Leishmania donovani* // *Experimental Parasitology*. 2018. Vol. 193. P. 5 – 19.
3. Hajibeygi M., Faghihi K., Shabanian M. Preparation and Characterization of New Photosensitive and Optically Active Poly(Amide-Imide)s from N-Trimellitylimido-L-Amino Acid and Dibenzalacetone Moiety in the Main Chain // *Polymer Science. Series B*. 2011. Vol.53. Iss. 9-10. P. 518 – 527.
4. C.C. Wang, P. Zheng, P.C. Chen Construction of synthetic pathways for raspberry ketone production in engineered *Escherichia coli* // *Applied Microbiology and Biotechnology*. 2019. Vol.103. № 9. P.3715-3725.
5. Periasamy R., Rajamohan R., Kothainayaki S., Sivakumar K. Spectral investigation and structural characterization of Dibenzalacetone: beta-Cyclodextrin inclusion complex // *Journal of Molecular Structure*. 2014. Vol. 1068. P. 155 – 163.
6. Гитис С.С., Глаз А.И., Иванов А.В. Практикум по органической химии. – М.: Высш. шк., 1991. – 303 с.