

**РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И МОЛЕКУЛЯРНОЙ  
ГЕОМЕТРИИ ДЛЯ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ АНТРОНА  
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Сердюк А. А.<sup>1,2</sup>, Пастернак Е. Н.<sup>3,4</sup>, Касянчук М. Г.<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ

<sup>2</sup>Таллинский технический университет

<sup>3</sup>Мариупольский государственный университет

<sup>4</sup>Отделение физико-химии горючих ископаемых Института физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ

ganna.serdyuk@gmail.com

Кето-енольная таутомерия играет существенную роль в реакциях окисления, протекающих по ионному механизму в основных средах. Антрону, веществу, представляющему интерес благодаря своей выраженной антипсориазной активности, присуща кето-енольная таутомерия, что существенно влияет на его реакционную способность. Одним из способов оценки влияния таутомерии на скорости и механизмы окислительных превращений антрона является определение термодинамических параметров для его таутомерных форм в различных растворителях квантово-химическими методами. В рамках настоящей работы с использованием методов PM6 и B3LYP проведен расчет параметров для структур антрона и антрола (табл. 1).

Таблица 1. Термодинамические характеристика антрона и антрола в различных средах

Параметр	Антрон			Антрол		
	PM6					
	Вакуум	MeCN	DMCO	Вакуум	MeCN	DMCO
$E_c$ , кДж/моль	41.4	17.6	17.3	68.7	49.7	49.5
$S$ , кДж/(моль·К)	0.441	0.449	0.448	0.431	0.431	0.431
$G^\circ$ , кДж/моль	-90.1	-116.4	-116.5	-59.8	-78.8	-79.0
$\mu$ , D	4.1	6.1	6.1	1.2	1.8	1.8
	B3LYP 6-311G(d,p)					
$E$ , а.о.	-614.91	–	-614.91	-614.90	–	-614.90
$G^\circ$ , а.о.	-614.75	–	-614.75	-614.74	–	-614.74
$S$ , кал/(моль·К)	102.8	–	103.0	105.3	–	101.8
$\mu$ , D	3.6	–	5.4	1.3	–	1.8

В расчетах выполнялась полная оптимизация параметров молекулярной геометрии объекта с последующим вычислением частот гармонических колебаний. В приближении изолированной частицы и с учетом влияния растворителя в рамках модели РСМ выполнена оценка параметров электронного строения антрона и антрола (рис. 1).

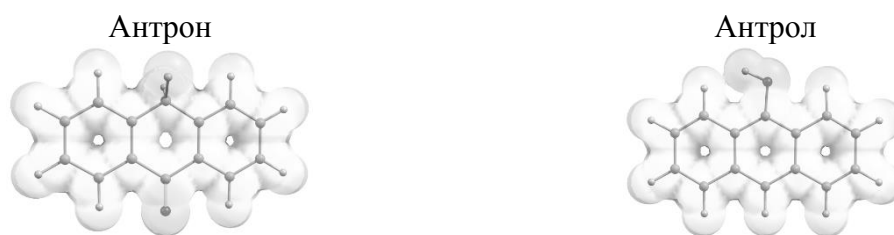


Рис. 1. Равновесная структура и 2D-карта МЕР антрона и антрола (метод расчета PM6)

Полученные результаты позволят в дальнейшем проводить моделирование механизмов реакций окисления антрона в различных средах.