

ДОСЛІДЖЕННЯ ДЕЛОКАЛІЗАЦІЇ ЗАРЯДУ У КАТІОНІ
[1,3]ТІАЗОЛО[2,3-с][1,2,4]ТРИАЗОЛІЇО

Фізер М. М., Фізер О. І., Сливка М. М.

Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна
mmfizer@gmail.com

Одним із потужних та доволі зручних методів побудови конденсованих поліциклічних систем є реакція електрофільної циклізації. Нами було вирішено використати реакцію протон-індукованої електрофільної циклізації на прикладі 4-металіл заміщених 1,2,4-триазолів для препаративного одержання триазол-вмісних катіонних систем із довгими алкільними замісниками та дослідити їх властивості на предмет можливості використання в якості поверхнево-активних речовин.

В даній роботі ми дослідили делокалізацію позитивного заряду на прикладі 3-гептил-6,6-диметил-5,6-дигідро-[1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазолію (рис. 1). В якості теоретичного методу дослідження було обрано напівемпіричний метод PM7, який реалізовано в програмі MOPAC2016. Для врахування впливу розчинника використано континуальну модель COSMO. Спершу, було розраховано, що протонування 3-гептил-6,6-диметил-5,6-дигідро-[1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазолу більш імовірно проходить подругому атому Нітрогену гетероциклічної системи (N7). Так, структура з протоном в другому положенні (N7) є на 1,4 ккал/моль більш вигідною, у порівнянні із структурою протонованою по першому атому нітрогену (N8). Проте, така різниця не є досить великою, аби могли виключити альтернативну структуру із нашого дослідження, тому розглядали обидва катіони.

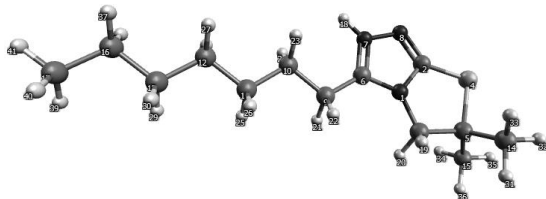


Рис. 1. Оптимізована молекула
3-гептил-6,6-диметил-5,6-дигідро-[1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазол-2-ію

Для фрагменту [1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазолію можна запропонувати декілька резонансних форм, які представлені на рис. 2. Для обох катіонів досліджено часткові заряди на атомах. У обох випадках, сума часткових зарядів атомів триазольного циклу близько +0,2. При включенні до сумарного часткового заряду, атому сірки (4S), метиленової групи тіазольного циклу, вузлового карбону (C5), двох метильних груп (C14, C15) та α -метиленової групи (C9) отримуємо частковий заряд $> +0.9$. Все це свідчить про значну делокалізацію позитивного заряду на сусідніх групах, з'єднаних із [1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазолієвою системою.

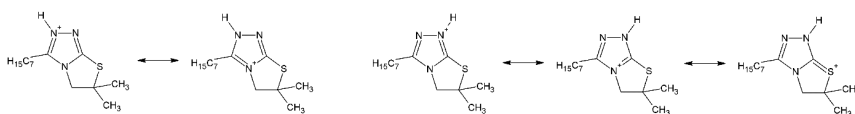


Рис. 2. Пропоновані резонансні форми