

**ИССЛЕДОВАНИЕ КЕТО-ЕНОЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ
1,1,1-ТРИФТОР-6-ФЕНИЛГЕКС-5-ЕН-2,4-ДИОНА
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ
С ПРИМЕНЕНИЕМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

Валиев Ф.Д., Лебедева Е.Л., Жарков Г.П.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Известно, что β -дикетоны являются эффективными экстрагентами для ионов различных металлов. Для оптимизации производственных процессов, связанных с экстракцией, требуется фундаментальное исследование кето-енольных и протолитических равновесий методом спектрофотометрии. Для этого необходимо определить полосы собственного поглощения каждой формы реагента в различных средах.

Целью настоящей работы является качественное определение кето- и енольной формы, енолят-иона 1,1,1-трифтор-6-фенилгекс-5-ен-2,4-диона, образуемых при добавлении кислоты или основания в различных растворителях, с применением спектрофотометрического метода. Эксперимент состоял в приготовлении ряда растворов, содержащих разные концентрации 1,1,1-трифтор-6-фенилгекс-5-ен-2,4-диона в хлороформе, этиловом спирте (98 %) и в смеси этанол-вода 1:1. Оптическую плотность измеряли на спектрофотометре Evolution 350 в интервале длин волн от 1100 до 190 нм в кварцевых кюветах с $l = 1$ см относительно воздуха при постоянной времени 0.2. Полученные спектры поглощения обрабатывали с использованием фильтра Савицкого – Голея. Далее спектры обрабатывали в программе TRIANG для оценки числа светопоглощающих частиц. Затем спектры были рассчитаны после эксперимента в программном пакете ORCA для квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) с применением функционалов: BP, LDA, BLYP, PW91, B3LYP, B3PW, PBE0, TPSS, TPSSH, M06L. Расчеты позволили провести идентификацию енолят-иона и разрешить спектры в смеси этанол-вода 1:1. Таким образом при добавлении основания в серию растворов в смеси этанол-вода 1:1 было обнаружено присутствие енолят-иона.

Результаты эксперимента и расчеты представлены в таблице.

**Сравнение результатов квантово-химических расчетов
и экспериментальных данных**

Функционал	λ_{\max} (кето-формы), нм	δ , %	λ_{\max} (енольной формы), нм	δ , %	λ_{\max} (енолят-иона), нм	δ , %
B3LYP	305	2.0	361	2.3	305/353	2.0/0.0
B3PW	302	1.0	381	7.9	302/353	1.0/0.0
PBE0	297	0.7	354	0.3	295/342	1.3/3.1