

А. Н. Цмокалюк, А. В. Ивойлова,  
А. Н. Козицина, О. С. Коптяева,  
Ю. А. Азев

Уральский федеральный университет  
им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620078, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 28,  
atsmok@mail.ru

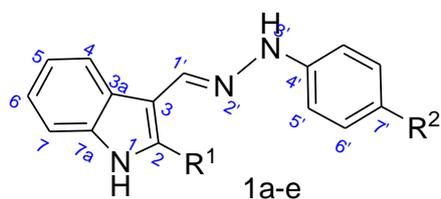
## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ И РАСЧЕТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ АРИЛГИДРАЗОНОВ ИНДОЛКАРБАЛЬДЕГИДОВ КАК ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НУКЛЕОФИЛОВ\*

**Ключевые слова:** арилгидразоны индол-3-карбальдегидов, вольтамперометрия, ЭПР, С,С-сочетание.

Гидразоны индолкарбоксальдегидов – перспективные синтоны для создания мультитаргетных лекарственных препаратов.

Молекулы гидразонов индолкарбальдегидов являются многоцентровым нуклеофильными реагентами, которые вступают в реакции С,С-сочетания с широким рядом гетероциклических электрофилов.

Оценка способности соединений к окислению может использоваться при характеристике нуклеофильных свойств соединений. В ходе работы определены потенциалы окисления гидразонов **1** методом вольтамперометрии. Электронодонорные заместители R<sup>1</sup> и R<sup>2</sup> уменьшают потенциал окисления, а электроноакцепторные – увеличивают.



- a:** R<sup>1</sup> = Me; R<sup>2</sup> = NO<sub>2</sub>  
**b:** R<sup>1</sup> = Me; R<sup>2</sup> = Me  
**c:** R<sup>1</sup> = Me; R<sup>2</sup> = F  
**d:** R<sup>1</sup> = H; R<sup>2</sup> = H  
**e:** R<sup>1</sup> = Me; R<sup>2</sup> = H

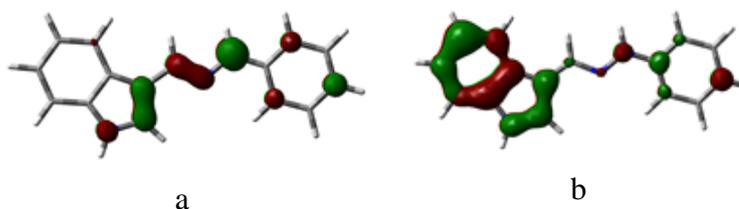


Рисунок 1. Электронные плотности соединения **1d**  
на а – ВЗМО, б – ВЗМО-1, ВЗМО-2

На основании линейной регрессии между энергией сродства к электрону катионов гидразонов **1** и потенциала их окисления было сделано предположение об одноэлектронном характере процесса.

Для раствора соединения **1b** в ацетонитриле, имеющего минимальный потенциал окисления, зарегистрирован сигнал в ЭПР-спектре. Экспериментальный спектр сигнала совпадает с расчетным спектром катион радикала этого соединения.

Квантово-химические расчеты электронной плотности трех верхних МО для гидразона **1d** позволили оценить локализации электронной плотности и выявить нуклеофильные центры в молекуле соединения.

Из визуального анализа распределения электронной плотности можно предположить, что С-нуклеофильными центрами соединений **1** могут быть С2-, С5-, С7-атомы, что согласуется экспериментальными данными реакций С,С-сочетания гидразонов **1** с хинозалоном.

*\* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-33-00727 мол\_a .*

УДК 544.169

**А. Н. Цмокалюк<sup>1</sup>, Т. Г. Федорченко<sup>2</sup>, Г. Н. Липунова<sup>1,2</sup>, А. Н. Козицина<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>Уральский федеральный университет  
им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620078, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 28,  
atsmok@mail.ru,*

*<sup>2</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,  
620137, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ 6-R-1,3-ДИФЕНИЛ-5-(БЕНЗОТИАЗОЛ-2-ИЛ) ВЕРДАЗИЛОВ МЕТОДАМИ ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ И ТФП РАСЧЁТОВ**

**Ключевые слова:** вердазилы, ТФП метод, ЭПР, радикалы.

Вердазилы относятся к N-центрированным органическим радикалам и, благодаря уникальной высокой химической стабильности, обратимости окислительно-восстановительных процессов, способности к координации и синтетическому потенциалу, пользуются спросом для конструирования современных материалов [1].