

DOI: 10.15643/vnpm-2023-52

## ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ В ИК-СПЕКТРАХ 5-(1-ПЕНТИЛ-4-МЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА

*Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Иванов С.П.*

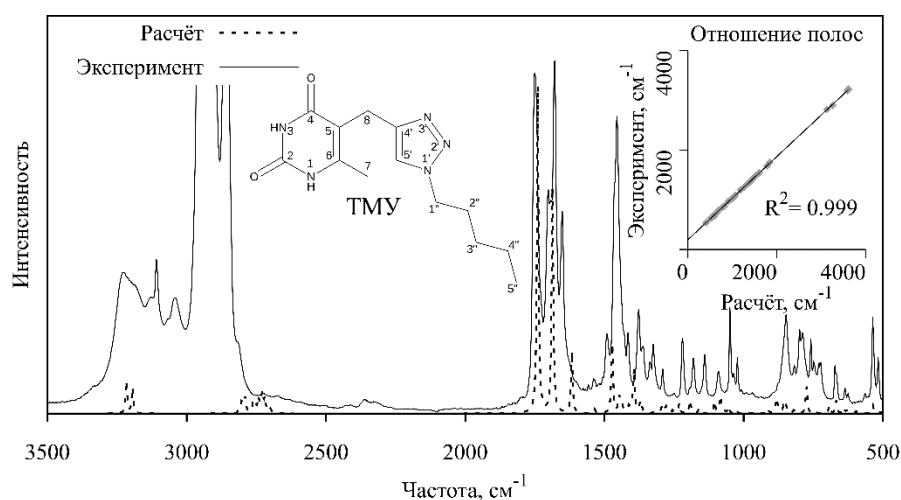
*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,*

*лаборатория физико-химических методов анализа, Уфа, Россия*

*e-mail: [pyshkinlexeylexeich@gmail.com](mailto:pyshkinlexeylexeich@gmail.com)*

Ковалентное связывание циклов урацила и 1,2,3-триазола в общую структуру, является очень многообещающим с точки зрения создания новых мотивов, несущих азотистое основание, которые в дальнейшем могут быть использованы для самосборки супрамолекулярных систем и как новые комплексообразующие агенты. Ранее был синтезирован 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацил (ТМУ) [1]. При работе с ТМУ столкнулись с его низкой растворимостью в воде и диметилсульфоксиде, что приводило к сложностям при записи ЯМР спектров изучаемых комплексных соединений ТМУ с 3d-металлами. В связи с этим, для подтверждения структуры комплексов большую актуальность приобретают методы анализа в твердом состоянии, в частности ИК-спектроскопия.

Целью данной работы являлось полное отнесение колебаний экспериментальных ИК-спектров молекулы 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила с использованием расчетных методов.



ИК спектры регистрировались на Фурье-спектрофото-метре IR Prestige-21 (Shimadzu) в ГХБД и вазелиновом масле в диапазоне волновых чисел – 4000-400 см<sup>-1</sup>. Расчеты проведены в программе Gaussian09. В качестве основного приближения использовали функционал M06 в сочетании с базисным набором def2-tzvp. Для количественного определения вкладов

колебаний в каждую полосу поглощения ИК было использовано программное обеспечение «VEDA».

Молекула ТМУ имеет много функциональных групп, что усложняет интерпретацию ИК-спектра. Для интерпретации полос поглощения ИК спектра были применены квантово-химические методы. На рисунке приведены экспериментальный и расчетный ИК-спектры ТМУ. Определены типы и вклады колебаний (в процентах) в каждую полосу поглощения ИК. Для корректного отнесения колебаний молекулы ТМУ, проанализированы и сопоставлены расчетные и экспериментальные ИК-спектры как самого ТМУ, так и модельного соединения 5,6-диметилурацила.

Таким образом, в работе проведено полное отнесение ИК-спектра молекулы 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила.

### Литература

1. Ахияров А.А., Губайдуллина Л.М. и др. // Журнал физической химии. 2021. Т.95. №2. С. 207–212.