

**ПРОТОНУВАННЯ 5-АМІНО-3-МЕРКАПТО-1,2,4-ТРИАЗОЛУ**

ФІЗЕР М.<sup>1</sup>, СЛИВКА М.<sup>1</sup>, БАУМЕР В.<sup>2</sup>, МАРІЙЧУК Р.<sup>3</sup> ТА ЛЕНДЕЛ В.<sup>1</sup>

1. Ужгородський національний університет, пр. Науки, 15, Ужгород, Україна

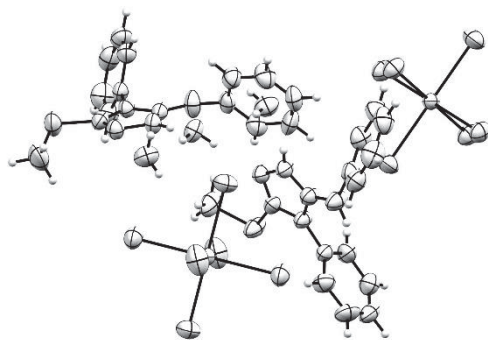
2. Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів", Національної академії наук України, пр. Науки, 60, Харків, Україна

3. Prešovská univerzita v Prešove, вул. 17 Novembra, 1, Prešov, Slovakia

[max.fizer@uzhnu.edu.ua](mailto:max.fizer@uzhnu.edu.ua)

Проведено теоретичний розрахунок енергії протонування ряду заміщених похідних 5-аміно-3-меркапто-1,2,4-триазолу. В якості калібрувальної вибірки ми використали 18 нітрогенвмісних гетероциклічних сполук з відомими значеннями рKa. Оптимізацію геометричних параметрів молекул та розрахунок відповідних термохімічних поправок проводили методом PBE/6-311G(d,p). Для оптимізованих структур обчислювали повну енергію на рівні PBE0-D3/6-311++G(2d,2p) з урахуванням впливу розчинника за допомогою континуальної моделі SMD. Отримано хорошу кореляцію ( $R^2 = 0.95$ ) між теоретичними та експериментальними даними.

Цікаво відмітити, що 5-аміно-1,2,4-тіазол-3-тіони у тій формі є органічними основами середньої сили, з відповідними рKa у діапазоні 4,0-6,2. Також всі розглянуті S-метил похідні є більш основними, ніж аналогічні структури з карбоксиметильною групою, що можна пояснити електроакцепторним впливом замісника при екзоциклічному атомі сірки. Вплив груп, біля екзоциклічного нітрогену, узгоджується з електродонорними властивостями, зокрема основність збільшується в ряді Ph <H <Me. І DFT розрахунки і експериментальні рентгеноструктурні дані на прикладі гексабромтелурату 3-метилтіо-4-феніл-5-феніламіно-1,2,4-триазолу [1] свідчать про більшу здатність до протонування нітрогену триазольного циклу в положенні 1 (Рис.1).



**Рис. 1** – структура гексабромтелурату 3-метилтіо-4-феніл-5-феніламіно-1,2,4-триазолу.

**Література:**

[1] M. Fizer, M. Slivka, R. Mariychuk, V. Baumer, V. Lendel, *J. Mol. Struct.* **1144**, 216-224 (2017).