

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра аналитической химии

МАКАСЬ Анастасия Сергеевна

**СИНТЕЗ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ МЕЗОИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
5-ИМИНОТЕТРАЗОЛА**

Дипломная работа

Научный руководитель:
старший преподаватель кафедры
общей химии и методики
преподавания химии
В. А. Будевич

Допущена к защите

«__» _____ 2024 г.

Заведующий кафедрой аналитической химии
доктор химических наук М.Ф. Заяц

Минск, 2024

РЕФЕРАТ

Дипломная работа: 56 с., 37 рис., 10 табл., 78 источников.

Ключевые слова: МЕЗОИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ, 1,3-ДИАЛКИЛ-5-ИМИНОТЕТРАЗОЛЫ, *N*-ДИЗАМЕЩЕННЫЕ ТЕТРАЗОЛЫ, КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА, КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕТРАЗОЛА, КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, АЗИД-АЛКИНОВОЕ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ.

Объекты исследования: 1,3-ди-*трет*-бутил-5-иминотетразол, 1-метил-3-*трет*-бутил-5-иминотетразол, 3-метил-1-*трет*-бутил-5-иминотетразол, 1,3-диметил-5-иминотетразол, 1,2-ди-(1,3-ди-*трет*-бутил-5-иминотетразолил)-этан, 1,4-ди-*трет*-бутил-5-иминотетразол, 1-метил-4-*трет*-бутил-5-иминотетразол, 1,4-диметил-5-иминотетразол; 1,3-ди-*трет*-бутил-5-(бензоилимино)-тетразол; координационные соединения меди с 1,3-ди-*трет*-бутил-5-(бензоилимино)-тетразолом, 1-*трет*-бутил-5-(бензоилимино)-тетразолом и хлором в качестве лигандов.

Предмет исследования: реакционная способность мезоионных 1,3-диалкил-5-иминотетразолов и их производных, структура и каталитические свойства комплексных соединений меди, полученных с использованием мезоионных 5-иминотетразолов в качестве лигандов.

Цель исследования: синтез, исследование структуры и каталитических свойств комплексных соединений меди, полученных с использованием мезоионных 5-иминотетразолов в качестве лигандов.

Методы исследования: для синтеза лигандов и комплексов применялись методы органического синтеза; для установления структуры и свойств соединений рентгеноструктурный анализ (РСА), ГХ-МС, УФ-видимая спектроскопия, рН-метрическое титрование; исследование каталитических свойств проводилось на модельных реакциях; для расчета газофазной основности и величин $pK(BH^+)$ применялись методы теории функционала плотности с использованием программного пакета GAUSSIAN.

Полученные результаты и их новизна: установлены константы кислотности сопряженных кислот для ряда 1,3- и 1,4-диалкил-5-иминотетразолов; разработаны оптимальные пути синтеза координационных соединений производных мезоионных тетразолов с переходными металлами; исследована структура и показана высокая каталитическая активность полученных комплексов в реакциях азид-алкинового циклоприсоединения.

РЭФЕРАТ

Дыпломная праца: 56 с., 37 мал., 10 табл., 78 крыніц.

Ключавыя словы: МЕЗАІОННЫЯ ЗЛУЧЭННІ, 1,3-ДЫЯЛКІЛ-5-ІМІНАТЭТРАЗОЛЫ, N-ДЫЗАМЕШЧАНЫЯ ТЭТРАЗОЛЫ, КІСЛОТНА-АСНОЎНЫЯ ЎЛАСЦІВАСЦІ, КААРДЫНАЦЫЙНЫЯ ЗЛУЧЭННІ НА АСНОВЕ ТЭТРАЗОЛА, КАТАЛІТЫЧНЫЯ ЎЛАСЦІВАСЦІ, АЗІД-АЛКІНАВАЕ ЦЫКЛАДАЛУЧЭННЕ.

Аб'екты даследавання: 1,3-ды-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразол, 1-метыл-3-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразол, 3-метыл-1-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразол, 1,3-дыметыл-5-імінатэтразол, 1,2-ды-(1,3-ды-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразаліл)-этан, 1,4-ды-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразол, 1-метыл-4-*трэт*-бутыл-5-імінатэтразол, 1,4-дыметыл-5-імінатэтразол; 1,3-ды-*трэт*-бутыл-5-(бензаіліміна)-тэтразол; каардынацыйныя злучэнні медзі з 1,3-ды-*трэт*-бутыл-5-(бензаіліміна)-тэтразолам, 1-*трэт*-бутыл-5-(бензаіліміна)-тэтразолам і хлорам у якасці лігандаў.

Прадмет даследавання: рэакцыйная здольнасць меаіонных 1,3-дыялкіл-5-імінатэтразолаў і іх вытворных, структура і каталітычныя ўласцівасці комплексных злучэнняў медзі, атрыманых з выкарыстаннем меаіонных 5-імінатэтразолаў у якасці лігандаў.

Мэта даследавання: сінтэз, даследаванне структуры і каталітычных уласцівасцяў комплексных злучэнняў медзі, атрыманых з выкарыстаннем меаіонных 5-імінатэтразолаў у якасці лігандаў.

Метады даследавання: для сінтэзу лігандаў і комплексаў прымяняліся метады арганічнага сінтэзу; для ўстанаўлення структуры і ўласцівасцей злучэнняў рэнтгенаструктурны аналіз (РСА), ГХ-МС, УФ-бачная спектраскапія, рН-метрычнае тытраванне; даследаванне каталітычных уласцівасцей праводзілася на мадэльных рэакцыях; для разліку газафазнай асноўнасці і велічынь $pK(BH^+)$ ужываліся метады тэорыі функцыяналу шчыльнасці з выкарыстаннем праграмнага пакета GAUSSIAN.

Атрыманыя вынікі і іх навізна: устаноўлены канстанты кіслотнасці спалучаных кіслот для шэрагу 1,3- і 1,4-дыялкіл-5-імінатэтразолаў; распрацаваны аптымальныя шляхі сінтэзу каардынацыйных злучэнняў вытворных меаіонных тэтразолаў з пераходнымі металамі; даследавана структура і паказана высокая каталітычная актыўнасць атрыманых комплексаў у рэакцыях азід-алкінавага цыкладалучэння.

ANNOTATION

Graduate work: 56 p., 37 ill., 10 tab., 78 sources.

Key words: MESOIONIC COMPOUNDS, 1,3-DIALKYL-5-IMINOTETRAZOLES, N-DISUBSTITUTED TETRAZOLES, ACID-BASE PROPERTIES, TETRAZOLE-BASED COORDINATION COMPOUNDS, CATALYTIC PROPERTIES, AZIDE-ALKYNE CYCLOADDITION.

Objects of research: 1,3-di-*tert*-butyl-5-iminotetrazole, 1-methyl-3-*tert*-butyl-5-iminotetrazole, 3-methyl-1-*tert*-butyl-5-iminotetrazole, 1,3-dimethyl-5-iminotetrazole, 1,2-di-(1,3-di-*tert*-butyl-5-iminotetrazolyl)-ethane, 1,4-di-*tert*-butyl-5-iminotetrazole, 1-methyl-4-*tert*-butyl-5-iminotetrazole, 1,4-dimethyl-5-iminotetrazole; 1,3-di-*tert*-butyl-5-(benzoylimino)-tetrazole; copper coordination compounds with 1,3-di-*tert*-butyl-5-(benzoylimino)-tetrazole, 1-*tert*-butyl-5-(benzoylimino)-tetrazole and chlorine as ligands.

Subject of research: reactivity of mesoionic 1,3-dialkyl-5-iminotetrazoles and their derivatives, structure and catalytic properties of copper complex compounds obtained using mesoionic 5-iminotetrazoles as ligands.

Purpose of the research: synthesis, study of the structure and catalytic properties of copper complex compounds obtained using mesoionic 5-iminotetrazoles as ligands.

Research methods: methods of organic synthesis were used for the synthesis of ligands and complexes; single crystal X-ray analysis, GC-MS, UV/Vis spectroscopy and pH-metric titration were used to establish the structure and properties of compounds; the investigation of catalytic properties was carried out on model reactions; density functional theory methods with using the GAUSSIAN software package were used to calculate gas-phase basicity and $pK(BH^+)$ values.

The obtained results and their novelty: the acidity constants of conjugate acids for a number of 1,3- and 1,4-dialkyl-5-iminotetrazoles were established; optimal ways for the synthesis of coordination compounds of mesoionic tetrazoles derivatives with transition metals have been developed; the structure was investigated and the high catalytic activity of the obtained complexes in azide-alkyne cycloaddition reactions was demonstrated.