



СИНТЕЗ И РАМАНОВСКИЙ СПЕКТР (Z)-3-(2-БЕНЗОИЛГИДРАЗИЛИДЕН)-N-ФЕНИЛ БУТАНАМИДА

Сатторова С.З. ¹[0000-0003-0004-5631], Худоярова Е.А. ²[0000-0003-3537-2632],
Абдурахмонов С.Ф. ³[0000-0002-5805-4947], Умаров Б.Б. ⁴[0000-0002-0479-3090]

¹Докторант Бухарского государственного университета,
E-mail: s.z.sattorova@gmail.com

²PhD, доцент Бухарского государственного университета,
E-mail: xudoyorovaetibor766@gmail.com

³PhD, доцент Бухарского государственного университета,
E-mail: abdu_sayfiddin@mail.ru

⁴д.х.н., профессор Бухарского государственного университета,
E-mail: umarovbako@mail.ru

Аннотация. В данной работе представлен синтез нового производного гидразона — (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-фенилбутанамида, полученного методом конденсации ацетоацетанилида с бензоилгидразидом в среде метанола. Установлена возможность существования соединения в различных таутомерных формах, включая кето- и енол-гидразонную. С использованием рамановской спектроскопии проанализированы колебательные спектры соединения, идентифицированы характерные полосы, соответствующие функциональным группам — C=O, C=N, N-H, а также ароматическим фрагментам. Выявлено, что соединение преимущественно существует в кето-форме с Z-конфигурацией, что подтверждено положением полос в спектре и предполагаемым внутримолекулярным водородным взаимодействием. Полученные результаты подтверждают предложенную структуру и создают основу для дальнейших исследований комплексообразующих свойств соединения.

Ключевые слова: рамановская спектроскопия, гидразон, синтез, вибрационные полосы.

Abstract. This study reports the synthesis of a new hydrazone derivative, (Z)-3-(2-benzoylhydrazonylidene)-N-phenylbutanamide, obtained via the condensation of acetoacetanilide with benzoylhydrazide in methanol. The possibility of tautomeric equilibrium involving keto and enol-hydrazone forms was established. Raman spectroscopy was used to analyze the vibrational spectrum of the compound, and characteristic bands corresponding to functional groups such as C=O, C=N, N-H, and aromatic fragments were identified. It was found that the compound predominantly exists in the keto form with a Z-configuration, which is supported by spectral data and the proposed intramolecular hydrogen bonding. The results confirm the proposed molecular structure and provide a foundation for further studies on the complexation behavior of the compound.

Key words: Raman spectroscopy, hydrazone, synthesis, vibrational bands.

Введение

Гидразоны представляют собой важный класс органических соединений, обладающих широкой областью применения в медицине, аналитической химии и координационной химии. Они демонстрируют разнообразные биологические свойства, включая антимикробную, противоопухолевую и противовоспалительную активность. Особый интерес вызывают гидразоны, полученные на основе ароматических кетонов и гидразидов, поскольку их структура позволяет варьировать электронные и пространственные характеристики молекулы [1-3].

Среди производных гидразонов особое внимание уделяется бензоилгидразонам, способным к образованию устойчивых комплексов с ионами переходных металлов. Кроме того, такие соединения могут существовать в виде геометрических изомеров (E/Z), что влияет на их физико-химические свойства. В настоящей работе представлен синтез нового соединения - (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-



фенилбутанамида. Основной целью исследования является установление структуры полученного соединения с использованием современных спектроскопических методов, включая ИК-, УФ- и ЯМР-спектроскопию [4-7].

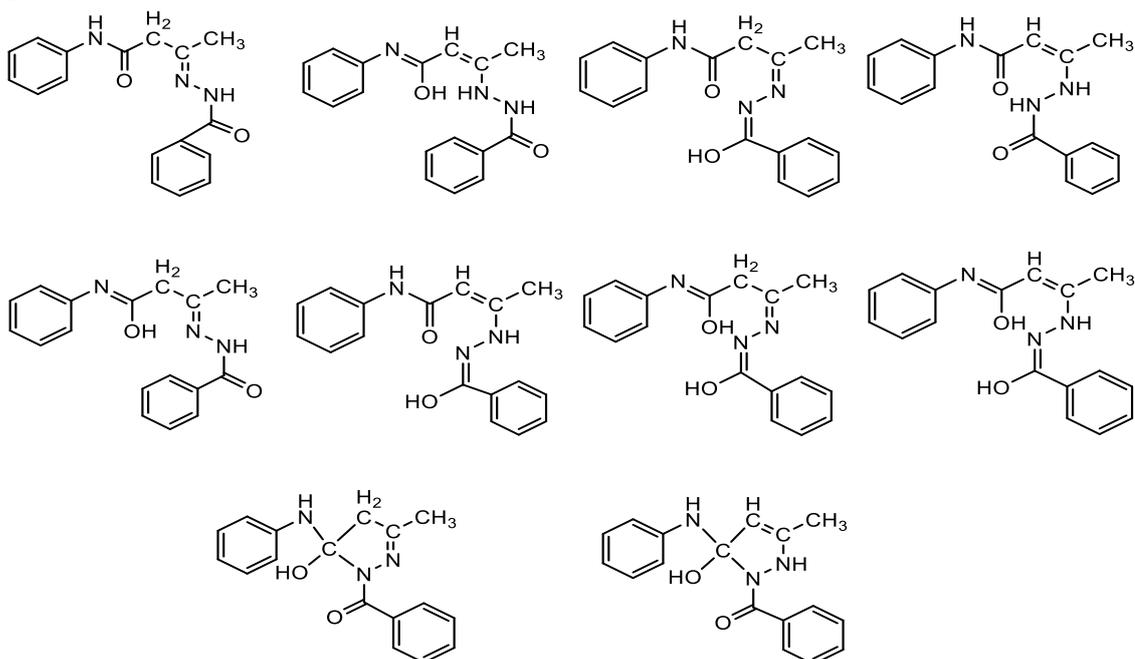
Экспериментальная часть

Синтез (Z)-3-(2-бензоилгидразилен)-N-фенил бутанамида. В круглодонную колбу емкостью 250 мл поместили 0,01 моль (1,77 г) ацетоацетанилида и залили 50 мл абсолютного метанола. К колбе присоединяли обратный холодильник, закрепили на штативе и нагревали смесь при температуре 30–40 °С и перемешивании до образования однородного раствора. Взяв стакан объемом 150 мл, отмерили (1,36 г) бензоилгидраза и растворили в 50 мл метилового спирта. Раствор из стакана переливают в колбу и присоединяют обратный холодильник. Реакционную смесь кипятили на водяной бане в течение 3 часов при постоянном перемешивании. Через три дня часть растворителя удалили в вакууме, а остаток оставили в вытяжном шкафу для испарения. Оставшийся остаток, бензоилгидразон ацетоацетанилида, отфильтровывали и сушили на воздухе. $C_{17}H_{17}N_3O_2$; $M_r = 295$ г/моль. Получено – 2,8 г, ($C_{17}H_{17}N_3O_2$) выход – 94,9%.

Результаты и обсуждения

(Z)-3-(2-бензоилгидразилен)-N-фенилбутанамид способен к существованию в различных таутомерных формах за счет подвижности протона между атомами азота и кислорода в гидразонной системе. На основании химической структуры соединения можно выделить как минимум две основные формы:

1. Кето-форма, в которой сохраняется структура с карбонильной группой (C=O) при бензоиле и протон находится на атоме азота гидразона (–NH–N=C–). Это форма наиболее стабильна и преобладает в растворе и твердом состоянии.
2. Енольная форма, в которой происходит сдвиг протона с –NH– на атом кислорода, сопровождающийся образованием C=N–N–OH (так называемая енол-гидразоновая форма). Эта форма менее устойчива, но может наблюдаться при определенных условиях.





Таутомерные формы (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-фенилбутанамида. Кроме того, возможна амидо-имидазольная таутомерия, когда протон смещается между амидным азотом и кислородом, а также внутримолекулярное водородное связывание, способное стабилизировать определённую таутомерную форму.

Спектроскопические данные (в частности, положение полос C=O и C=N в рамановском спектре) подтверждают преимущественное существование кето-таутомера. Z-конфигурация подтверждается устойчивостью внутреннего водородного мостика, образующегося между атомом водорода амидной группы и атомом кислорода бензоилгруппы.

Рамановский спектр (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-фенил бутанамида был зарегистрирован в диапазоне $400\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ (рис.-1). В спектре наблюдаются следующие характерные полосы: В области $\sim 1600\text{--}1620\text{ см}^{-1}$ фиксируется интенсивная полоса, соответствующая валентным колебаниям C=N гидразонной группы. Это подтверждает наличие азометинового фрагмента. Сигнал в области 1660 см^{-1} указывает на присутствие карбонильной группы C=O (амидной), что характерно для подобного рода соединений. Наблюдаются сильные пики в области $1570\text{--}1600\text{ см}^{-1}$, соответствующие скелетным колебаниям ароматических C=C связей. В области $1300\text{--}1350\text{ см}^{-1}$ отмечены полосы, соответствующие колебаниям C–N и N–N связей, присутствующих в гидразонной системе. Слабые, но заметные полосы при $\sim 3050\text{ см}^{-1}$ и $\sim 3200\text{ см}^{-1}$ соответствуют ароматическим C–H и N–H валентным колебаниям соответственно. В области $1000\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ наблюдаются множественные пики средней интенсивности, что может быть связано с деформационными колебаниями C–H и с колебаниями связи C–C в ароматических системах. В низкочастотной области $600\text{--}800\text{ см}^{-1}$ присутствуют полосы, обусловленные плоскостными деформациями ароматического кольца и, возможно, колебаниями связи N–N.

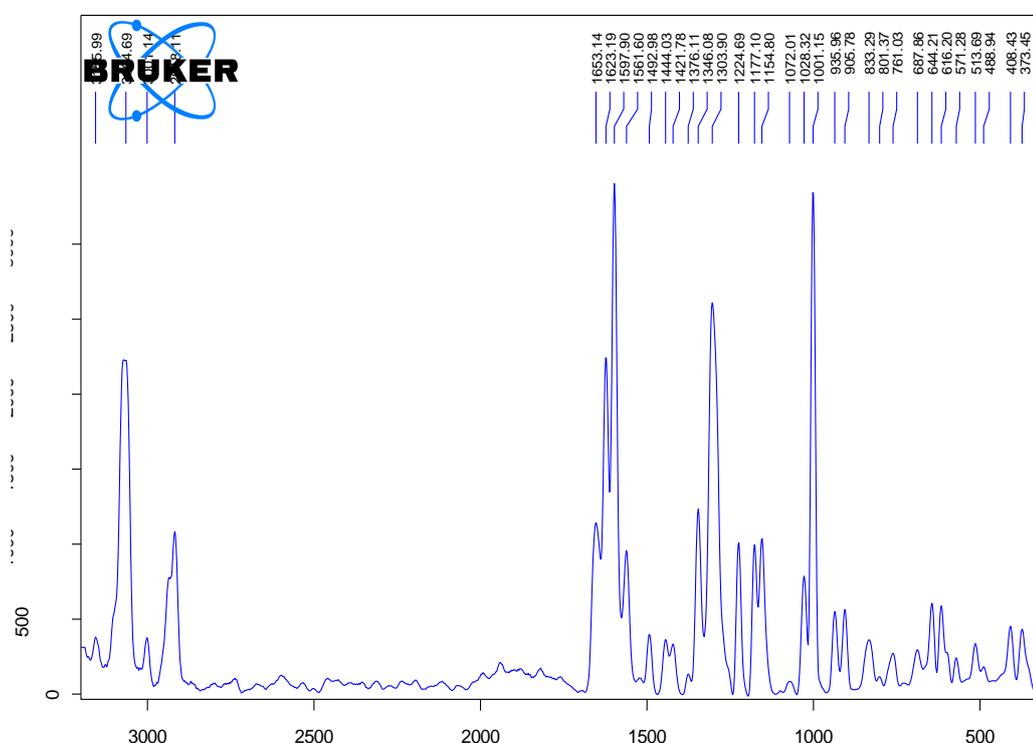


Рис.-1. Рамановский спектр (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-фенилбутанамида.



Анализ рамановского спектра подтверждает наличие основных функциональных групп, характерных для структуры синтезированного соединения. Совокупность спектральных данных позволяет сделать вывод о правильности предполагаемой структуры и Z-конфигурации гидразонного фрагмента.

Вывод

В результате проведённой работы успешно синтезирован (Z)-3-(2-бензоилгидразилиден)-N-фенилбутанамид методом конденсации соответствующего гидразида с бензоилгидразоном. Структура соединения подтверждена с использованием рамановской спектроскопии. В спектре выявлены характерные полосы, соответствующие валентным и деформационным колебаниям функциональных групп — амидной, гидразонной и ароматических фрагментов. Обнаруженные сдвиги частот подтверждают образование (Z)-изомера и наличие внутримолекулярных взаимодействий, стабилизирующих структуру. Полученные данные могут быть использованы для дальнейших исследований по комплексообразованию и оценке спектроскопических свойств аналогичных соединений.

Использованная литература

- [1]. Вейганд-Хильгетаг. Методы эксперимента в органической химии. Перевод с нем. языка под редакцией проф. Н.Н. Суворова. - М.: Химия, 1968.- С. 847-886.
- [2]. Умаров В.В. Комплексные соединения некоторых переходных металлов с Вис-5-оксипиразолинами. Дис. докт. хим. наук. - Ташкент. - ИУ АН РУз.- 1996.- 351 с.
- [3]. Abduraxmonov S.F., Tursunov M.A., Umarov B.B., Ergashov M.Y., Avezov Q.G. Research on Nickel(II) Complexes with Aroyl Hydrazones of 5,5-Dimethyl-2,4-Dioxohexanoic Acid Ethyl Ester. ISSN 0027-1314, Published in Vestnik Moskovskogo Universiteta, Seriya 2: Khimiya, 2021, No. 1, pp. 59–67.
- [4]. Abduraxmonov S.F., Tursunov M.A., Umarov B.B., Ergashov M.Y., Avezov Q.G. Research on Nickel(II) Complexes with Aroyl Hydrazones of 5,5-Dimethyl-2,4-Dioxohexanoic Acid Ethyl Ester. ISSN 0027-1314, Published in Vestnik Moskovskogo Universiteta, Seriya 2: Khimiya, 2021, No. 1, pp. 59–67.
- [5]. Sheldrick G.M. SHELXL-97. Program for the Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany, (1997). Siemens; XP. Molecular Graphics Program. Version 5.03. Siemens Analytical X-Ray Instruments Inc., Madison, Wisconsin, USA.- 1994.
- [6]. Турсунов М.А., Аvezов К.Г., Умаров Б.Б., Парпиев Н.А. Таутомерия ряду ацилгидразонов этилового эфира 5,5-диметил-2,4-диоксогексановой кислоты/ “Юқори малакали кадрлар тайёрлашнинг долзарб муаммолари” илмий-амалий анжуман материаллари.- БухДУ.- Бухоро, 11-12 марта 2016 года, С.159-162.
- [7]. S.Z.Sattorova, E.A.Xudoyorova, S.F.Abduraxmonov, B.B.Umarov. “Atsetoatsetanilid Benzoilgidrazoni kristallarining Hirshfelt sirt xossalari tahlili. Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo'llash orqali qishloq xo'jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari 2025-yil, 21-22-aprel, 316-317-betlar.