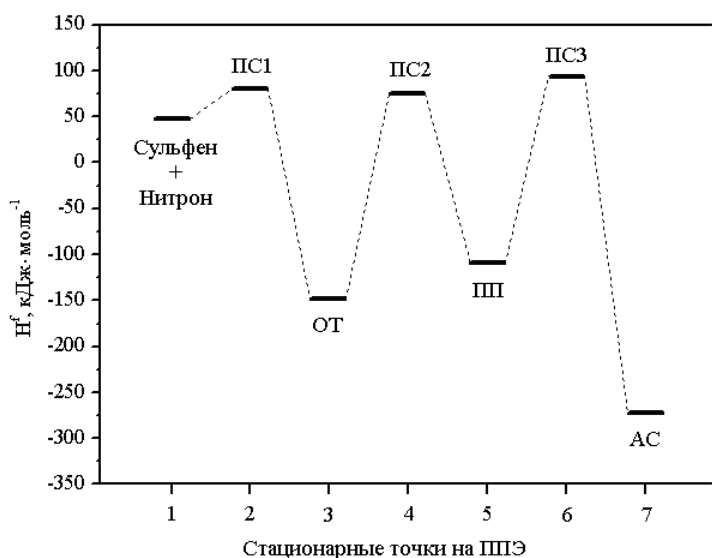
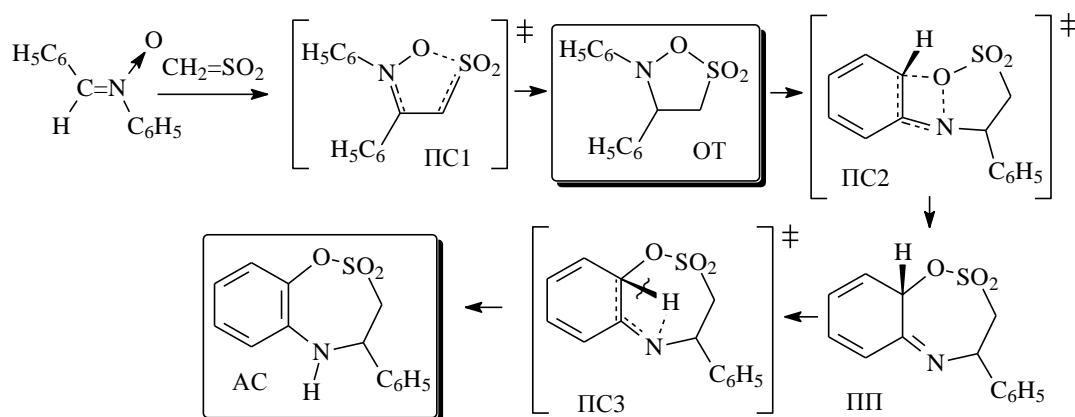


ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ СУЛЬФЕНА С ДИАРИЛНИТРОНОМ МЕТОДОМ РМ6

С. Н. Лящук

*Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М.Литвиненко НАН
Украины, ул.Р.Люксембург 70, 83114, Донецк, Украина, lyaschuk@ukr.net*

При исследовании модельной системы полуэмпирическим квантово-химическим методом РМ6 показано, что механизм реакции дифенилнитрона с сульфеном, в результате которой образуется азасульфон (АС) (4,5-дигидро-3H-1,2,5-бензоксатиазепин-2,2-диоксид), включает промежуточное образование нестойкого 1,2,5-оксатиазол-2,2-диоксида (ОТ) и его последующую изомеризацию в АС через переходные состояния ПС2, ПС3 и промежуточный продукт ПП:



Реакция в целом является экзотермической, а перегруппировка ОТ в АС термодинамически выгодной, что согласуется с экспериментальными результатами. Обсуждаются особенности отдельных стадий реакции и строения ПС и ПП.