

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ППЭ РЕАКЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ ДИОКСОНИЯ В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ

В. Н. Солкан

Учреждение Российской академии наук Институт органической химии
им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва

Ранее [1], было сделано предположение об образовании иона оксо-
диазония при синтезе аннелированных 1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксидов. Недавно
[2] обнаружено, что при действии серно-азотной нитрующей смеси на О-
метиловое производное 3-нитроамино-4-фенилфуразана (I) образуется
[1,2,5]оксадиазоло[3,4-с] циннолин-5-N-оксид (II) и высказано предположение об
участии в этой реакции в качестве интермедиата соответствующего иона оксо-
диазония, который вступает во внутримолекулярную реакцию электрофильного
ароматического замещения с фенильной группой. В настоящей работе методом
функционала плотности исследована поверхность потенциальной энергии (ППЭ)
объединенной молекулярной системы ((I) + H₂SO₄) для установления возможно-
сти существования иона оксодиазония. В результате локализации на данной ППЭ
ряда стационарных точек (включая ион оксодиазония), были вычислены термо-
динамические параметры последовательности каскадных элементарных реакций,
приводящих к образованию продукта (II). Сделан вывод, что при действии серно-
азотной нитрующей смеси на О-метиловое производное 3-нитроамино-4-
фенилфуразана (I) возможно образование иона оксодиазония в качестве интерме-
диата с последующим образованием [1,2,5]оксадиазоло[3,4-с] циннолин-5-N-
оксида (II) по механизму S_EAr.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундамен-
тальных исследований (проект 10-03-00752-а). Автор выражает признательность
дхн А. М. Чуракову за плодотворное обсуждение работы.

1. А. М. Churakov, V. A. Tartakovsky. *Chem. Rev.* **2004**. V. 104. P. 2601.
2. М. С. Кленов, М. О. Ратников, А. М. Чураков, Ю. А. Стреленко, В. А. Тартаковский. *Изв. АН Сер. Хим.* **2011** (в печати).