

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК. 547.867.2. Поступила в редакцию 20 декабря 2008 г.

Изучение строения 2-фенил-4Н-1,3,4-окса- и тиадiazин-5,6-дионов

© Кузьмич Николай Николаевич,⁺ Лалаев Борис Юрьевич и Яковлев Игорь Павлович*

Кафедра органической химии. Санкт-Петербургская государственная химико-фармацевтическая академия. ул. Проф. Попова, 14. г. Санкт-Петербург, 197376. Россия.

Тел.: (812) 234-11-72. E-mail: nnkuzmich@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 2-фенил-4Н-1,3,4-окса(тиа)дiazин-5,6-дионы, таутомерное равновесие, CBS-4М, ЯМР, ИК.

Аннотация

2-Фенил-4Н-1,3,4-окса(тиа)дiazин-5,6-дионы теоретически могут существовать в различных таутомерных формах. Методами ЯМР и ИК спектроскопии было показано, что в твердом состоянии и в растворах ДМСО эти соединения существуют главным образом в 5,6-диоксоформе, а в газовой фазе, как показывают термодинамические расчеты методом CBS-4М, возможно существование равновесной смеси 5,6-диоксо- и 6-оксо-4-ий-5-олатных таутомеров.