

Бромирование алкилбензолов молекулярным бромом в бинарных средах ($\text{CCl}_4:\text{As}_2\text{O}$ и $\text{As}_2\text{O}:\text{H}_2\text{O}$)

© Крылов Евгений Николаевич¹ и Вирзум Людмила Викторовна²

¹ Кафедра органической и биологической химии. Ивановский государственный университет.

Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (4932) 37-37-03. E-mail: enk2005@rambler.ru

² Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия. Ул. Советская, 45.
г. Иваново, 153000. Россия.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: алкилбензолы, бромирование, сольватация, квантовохимический расчет, одноэлектронный перенос, механизм реакции.

Аннотация

Субстратная и позиционная селективность реакции бромирования алкилбензолов молекулярным бромом в бинарной системе $\text{As}_2\text{O}:\text{CCl}_4$ экстремально зависят от температуры и состава растворителя, что указывает на сольватационный контроль ориентации электрофила и неравновесный характер сольватации переходного состояния с пересольватацией его в области малых мольных концентраций полярного компонента бинарного растворителя. Изменение соотношения между субстратной и *пара-/орто*-позиционной селективностью (симбатное \rightarrow антибатное) при изменении состава растворителя указывает на нестабильный механизм реакции, изменяющийся от классического Ar-S_E2 до механизма одноэлектронного переноса (SET).