

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROi: jbc-01/15-44-12-164 Подраздел: Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.787.31. Поступила в редакцию 21 ноября 2015 г.

Квантово-химическое и экспериментальное изучение анионных σ -аддуктов 2-метил-5,7-динитробензо[d]оксазола с метоксид-ионом

© Мухторов¹ Лоик Гургович, Блохин¹⁺ Игорь Васильевич,
Шахкельдян¹ Ирина Владимировна, Атрощенко¹ Юрий Михайлович,
Арляпов² Вячеслав Алексеевич, Кобраков^{3*} Константин Иванович
и Шумский⁴ Алексей Николаевич

¹ Кафедра химии. Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого.
Пр. Ленина, 125. Тула, 300026. Россия. Тел.: (4872) 35-78-08. E-mail: reaktiv@tspu.tula.ru

² Кафедра химии. Тульский государственный университет.

Пр. Ленина, 92. Тула, 300012. Россия. Тел.: (4872) 35-18-40. E-mail: v.a.arlyapov@gmail.com

³ Кафедра органической химии. Московский государственный университет дизайна и технологии.
Ул. Садовническая, 33. Москва, 117997. Россия. Тел.: (495) 955-35-58. E-mail: kobrakovk@mail.ru

⁴ Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН.

Ул. Косыгина, 4. Москва, 119334. Россия. Тел.: (495) 939-73-66. E-mail: shumsky@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 2-метил-5,7-динитробензо[d]оксазол, нуклеофильное присоединение, анионный σ -аддукт, полуэмпирический метод РМ6.

Аннотация

Полуэмпирическим методом РМ6 в газовой фазе и в метаноле рассчитаны заряды на атомах, а также вклады p_z -орбиталей атомов в НСМО молекулы 2-метил-5,7-динитробензо[d]оксазола. Рассчитаны стандартные теплоты образования предполагаемых продуктов присоединения метоксид-иона к молекуле субстрата, стандартные энтальпии и энергии Гиббса реакций. Установлено, что в метаноле определяющую роль играет зарядовый фактор, при этом атака нуклеофила наиболее вероятна по атомам углерода С-2, С-4 и С-6 субстрата. При действии карбоната цезия на 2-метил-5,7-динитробензо[d]оксазол в метаноле при комнатной температуре был выделен σ -аддукт, представляющий собой структуру с положением метоксильной группы у второго атома углерода оксазольного цикла. Строение полученного соединения доказано методами ЯМР (¹H ЯМР, ¹³C ЯМР, HSQC, HMBSC), ИК спектроскопии, а также элементным анализом.