

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/19-59-8-24 Подраздел: Органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.786.39. Поступила в редакцию 17 августа 2019 г.

Экспериментальное и теоретическое изучение фрагментации дихлор-3-арил-2,1-бензизоксазолов

© Котов^{1+*} Александр Дмитриевич, Форостянко¹ Анна Сергеевна,
Васильева¹ Елена Андреевна, Куничкина¹ Анна Сергеевна,
Проскурина¹ Ирина Константиновна и Кужин² Максим Борисович

¹ Ярославский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского. ул. Республиканская, 108. г. Ярославль, 150000. Ярославская область. Россия. Тел.: (4852) 73-15-29. E-mail: a.kotov@yspu.org

² Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова. ул. Советская, 14. г. Ярославль, 150003. Ярославская область. Россия. Тел.: (4852) 27-56-11. E-mail: kuzh@inbox.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 2,1-бензизоксазолы, антралилы, масс-спектрометрия, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

2,1-Бензизоксазолы или антралилы обладают разными видами биологической активности, находят применение для получения мономеров для полимерных материалов, красителей и других гетероциклических соединений. Кроме этого, 2,1-бензизоксазолы привлекают внимание исследователей из-за наличия слабой связи N-O, являющейся потенциальным местом раскрытия цикла в реакциях восстановления, окисления и различных трансформаций. Поэтому очень важным представляется изучение их строения, методов идентификации и реакционной способности в процессах, протекающих с их участием. Одними из эффективных современных методов исследования в химии являются хромато-масс-спектрометрия и квантово-химическое моделирование. А так как фрагментация молекул при их ионизации электронным ударом зависит от природы соединений и характеризует их реакционную способность в различных типах химических реакций, то целью данной работы было экспериментальное и теоретическое изучение фрагментации дихлор-3-фенил-2,1-бензизоксазолов. Для этого конденсацией нитроаренов с арилацетонитрилами в присутствии избытка гидроксида натрия синтезированы соответствующие дихлор-3-арил-2,1-бензизоксазолы. Методом хромато-масс-спектрометрии изучены направления фрагментации их молекулярных ионов. Установлено, что для всех исследованных соединений в масс-спектрах наблюдаются аналогичные осколочные фрагменты, что свидетельствует о схожих схемах их фрагментации. На основании данных квантово-химического моделирования с использованием программного комплекса PC GAMESS/FireFly 8.2 методом теории функционала плотности сделано предположение, что еще до распада молекулярных ионов дихлор-3-арил-2,1-бензизоксазолов происходит их быстрая трансформация в соответствующие катион-радикалы дихлоракридинонов с тем же самым атомарным составом. Дальнейший распад ионов дихлоракридинонов сопровождается выбросом атома хлора, монооксида углерода и скелетной перегруппировкой с образованием соответствующих ионов хлоркарбазолов. Ионы хлоркарбазолов далее выбрасывают молекулу хлороводорода с образованием катиона с m/z 164 и атомарным составом C₁₂H₆N.