

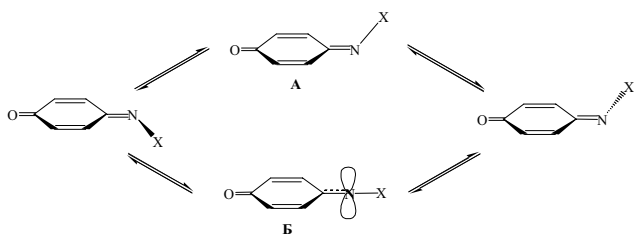
В.В. Пироженко, А.Б. Роженко, С.А. Коновалова, А.П. Авдеенко, О.П. Леденева

Z,E-ИЗОМЕРИЗАЦИЯ N-[АРИЛСУЛЬФОНИЛИМИНО(ФЕНИЛ)МЕТИЛ]-1,4-БЕНЗОХИНОНМОНОИМИНОВ

Институт органической химии НАН Украины, г. Киев
Донбасская государственная машиностроительная академия, г. Краматорск
Украинская инженерно-педагогическая академия, г. Славянск

На основании квантово-химических расчетов и ЯМР спектроскопии установлено, что для N-[арилсульфоилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноиминов характерно значительное снижение барьеров Z,E-изомеризации относительно хинониминной связи C=N¹ (топомеризации) по сравнению с другими типами бензохинониминов. Отсутствие проявления в спектрах ЯМР процессов Z,E-изомеризации относительно связи C=N² имидоильного фрагмента вызвано большой разностью заселенностей Z,E-изомеров относительно этой связи. Доказан инверсионный механизм топомеризации.

Для бензохинониминов, как представителей класса иминовых систем, характерно явление вырожденной и невырожденной Z,E-изомерии [1]. Процессы Z,E-изомеризации этих соединений могут осуществляться, в основном, по двум механизмам: путем вращения вокруг связи C=N через неплоское переходное состояние А, либо путем инверсии атома азота через линейное переходное состояние Б



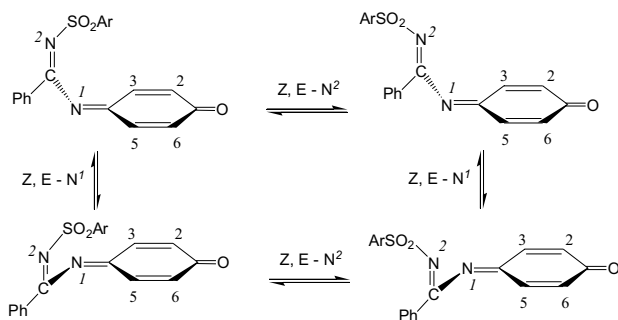
Для большинства исследованных N-замещенных иминов и 1,4-бензохинонмоноиминов характерен инверсионный механизм изомеризации [1–5]. Для 1,4-бензохинонмоноиминов величина энергетического барьера, определяющая возможность таких конформационных превращений, зависит от свойств заместителей как в хиноидном фрагменте, так и у атома азота, и лежит в пределах 40–100 кДж/моль [3–6], основное влияние на величину изомеризационного барьера при этом оказывает природа заместителей у атома азота – присоединение к иминному атому азота π-электроноакцепторных заместителей снижает барьер его инверсии. Так, при переходе от N-алкил- к N-арилпроизводным иминов барьеры инверсии резко (на ~40 кДж/моль) уменьшаются; при этом возможно изменение инверсионного механизма топомеризации

на вращательный [1, 2]. Аналогичная картина наблюдается и в 1,4-бензохинонмоноиминах: для N-арил-1,4-бензохинониминов выявлено значительное снижение величин энергий активации Z,E-изомеризации ($\Delta G_{298\text{ K}}^\ddagger$ 44–46 кДж/моль [3]) по сравнению с другими N-замещенными бензохинонмоноиминами: N-арилсульфонил-1,4-бензохинонимины – $\Delta G_{298\text{ K}}^\ddagger$ 65–80 кДж/моль [4], N-арилтио-1,4-бензохинонимины – $\Delta G_{298\text{ K}}^\ddagger$ 75–80 кДж/моль [5], N-арил-1,4-бензохинонимины – $\Delta G_{298\text{ K}}^\ddagger$ 75–95 кДж/моль [6].

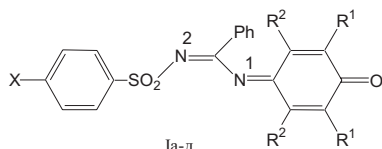
Рассматриваемые в данной работе N-[арилсульфоилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноимины структурно подобны N-арил-1,4-бензохинониминам и отличаются от последних заменой атома кислорода группы ArC(O)- на N-арилсульфоилиминогруппу (ArSO₂N=). Вследствие электроноакцепторного характера данной группировки для них также можно ожидать низкие энергии активации Z,E-изомеризации. Данное предположение подтверждается анализом ЯМР спектров ¹H и ¹³C этих соединений [7,8]. Так, протоны H^{2,6} и H^{3,5} и атомы углерода C^{2,6} и C^{3,5} хинониминного фрагмента незамещенных и симметрично замещенных в хиноидном ядре соединений при комнатной температуре являются попарно эквивалентными и проявляются в спектрах ЯМР ¹H и ¹³C, соответственно, одним сигналом. Магнитная эквивалентность отмеченных сигналов указывает на то, что скорость процесса вырожденной Z,E-изомеризации (топомеризации) при комнатной температуре достаточно высока. Исследования температурной зависимости вида спектров ЯМР данных соединений ранее не проводились, и количественные

оценки их величин барьеров топомеризации в литературе отсутствуют.

N-[Арилсульфолимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонимины отличаются от N-ароил-1,4-бензохинониминов тем, что имеют 2 иминных атома азота, и в них могут реализовываться 2 процесса – вырожденная Z,E-изомеризация (топомеризация) хинониминного атома азота N¹ (Z,E-N¹ процесс) и Z,E-изомеризация атома азота N² имидоильной группы (Z,E-N² процесс).



С целью выявления особенностей конформационных превращениях в имидоильных производных 1,4-бензохинонмоноиминов нами методами динамической спектроскопии ЯМР и квантовой химии были изучены N-[арилсульфолимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонимины (Ia–г), содержащие различные заместители в хиноидном ядре



X=H (а, б), CH₃ (в), Cl (г); R¹=R²=H (а), R¹=Me, R²=H (б, в), R¹=t-Bu, R²=H (г).

Проведенные нами методом динамической спектроскопии ЯМР ¹H исследования показали, что независимо от температуры регистрации спектров (–95^oC – +60^oC) протоны групп R¹ и R² в 1,4-бензохинонмоноиминах (Ia–г) характеризуются одним общим для каждой пары набором достаточно узких сигналов. Снижение температуры регистрации спектров этих соединений до –60^oC (растворы в CDCl₃) приводит лишь к незначительному их уширению. Разделения сигналов в каждой паре не наблюдается и при температурах ниже –90^oC (растворы в CD₂Cl₂). Это указывает на то, что процессы топомеризации относительно хинониминного фрагмента (Z,E–N¹ процесс) протекают в данных соединениях существенно быстрее, чем в других типах бензохинониминов, в частности в N-ароил-1,4-бензохинонмоноиминах [3]. Так, для последних уширение сигналов и их даль-

нейшее удвоение наблюдаются уже при температурах ниже –10^oC. Значительное уменьшение величины энергии активации реакции топомеризации в имидоильных производных (Ia–г) по сравнению с другими типами бензохинониминов может быть обусловлено как особенностями их пространственного строения, например, увеличением эффективного объема заместителя у атома азота связи C=N¹ хиноидного ядра, так и специфическими внутримолекулярными (электронными) взаимодействиями. Не исключено, что причиной такого снижения может быть и изменение механизма изомеризации, или его более сложный характер.

Необходимо также отметить, что во всем исследованном диапазоне температур в спектрах ЯМР соединений (Ia–г) независимо от природы и положения заместителей в хиноидном ядре, фенильный фрагмент при атоме углерода экзоциклической C=N² связи также характеризуются одним набором сигналов. Последнее может быть связано как с отсутствием процессов изомеризации относительно связи C=N² и существованием этих соединений лишь в одной конформации (Z- или E-изомер относительно этой связи), так и с очень быстрым протеканием данного процесса (Z,E–N² процесс).

С целью разрешения данного вопроса, а также более детального изучения процессов топомеризации, нами методом DFT с применением функционала B3LYP были выполнены квантовохимические расчеты основных (ОС) и переходных состояний (ПС) для обоих изомеризационных процессов (Z,E–N² и Z,E–N¹) на примере хинонмоноиминов (Ia, б).

Проведенные расчеты показали наличие трех основных состояний: ОС¹ и ОС^{1'}, соответствующих E-изомеру с анти-расположением фрагментов PhSO₂N= и Ph– по отношению к двойной связи C=N², и ОС², соответствующего Z-изомеру с син-расположением фрагментов PhSO₂N= и Ph– по отношению к двойной связи C=N² (рис. 1). Основное отличие состояний ОС¹ и ОС^{1'} заключается в различном расположении арилсульфонильного фрагмента, а разность энергий (DE¹) этих состояний составляет 6,34 кДж/моль для хинонмоноимина (Ia) и 5,61 кДж/моль для хинонмоноимина (Iб) (табл. 1). В связи с этим при расчете энергетических барьеров процессов изомеризации, которые оценивались как разность энергий соответствующих основных и переходных состояний, нами было использовано основное состояние ОС¹, отвечающее глобальному минимуму энергии.

Для анализа возможных конформационных превращений в хинониминах (Ia, б) нами также были рассчитаны энергии возможных переходных состояний (ПС) для процессов Z,E–N¹ и Z,E–N² (рис. 2). Анализ расчетных данных пока-

Энергии основных и переходных состояний и теоретические барьеры активации конформационных превращений хинонмоноимinov (Ia, б)

Соединение	Энергия				
	Основные состояния				
	OC ¹ , ат. ед.	OC ^{1'} , ат. ед.	ΔE ¹ , кДж/моль	OC ² , ат. ед.	ΔE ² , кДж/моль
Ia	-1465,745917	-1465,743502	6,34	-1465,740975	12,98
Iб	-1544,390856	-1544,388719	5,61	-1544,385723	13,48
	Переходные состояния				
	PC ¹ , ат. ед.	ΔE ³ , кДж/моль	PC ² , ат. ед.	ΔE ⁴ , кДж/моль	
Ia	-1465,718845	71,08	-1465,733249	33,26	
Iб	-1544,3643146	69,68	-1544,378758	31,76	

Примечание: ΔE¹=E(OC^{1'})-E(OC¹); ΔE²=E(OC²)-E(OC¹); ΔE³=E(PC¹)-E(OC¹) для процесса Z,E-N²; ΔE⁴=E(PC²)-E(OC¹) для процесса Z,E-N¹.

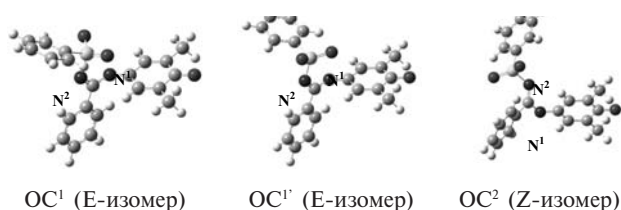


Рис. 1. Основные состояния OC¹, OC^{1'} (E-изомер) и OC² (Z-изомер) хинонмоноимина (Iб)

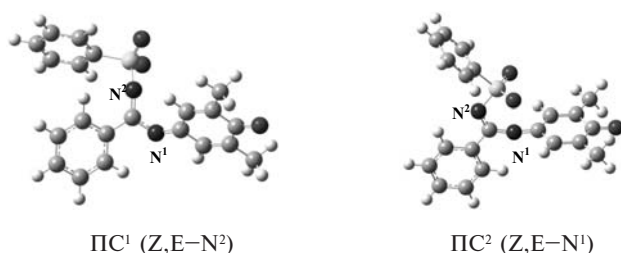


Рис. 2. Переходные состояния хинонмоноимина (Iб)

зывает, что, взаимопревращения изомеров в процессе Z,E-N² происходят по инверсионному механизму через переходное состояние PC¹ с близким к линейному расположением триады C=N²-S (рис. 2). Величина барьера изомеризации процесса Z,E-N² (ΔE³ в табл. 1) составляет 71,08 кДж/моль для соединения (Ia) и 69,68 кДж/моль для соединения (Iб), что находится в пределах, доступных для исследования методом ЯМР, но в экспериментальных спектрах ЯМР данный вид изомерии не проявляется. Это обусловлено тем, что разность энергий конформеров Z- (OC²) и E- (OC¹) (ΔE² в табл. 1) составляет 12,98 кДж/моль для соединения (Ia) и 13,48 кДж/моль для соединения (Iб), что при температуре 298 К в соответствии с уравнением Гиббса [9] соответствует соотношению заселенностей примерно 1:99,5, при этом существование Z-изомера становится маловероятным, а в спектрах ЯМР присутствуют сигналы только одного E-изомера. В связи с этим в дальнейшем при теоретической оценке барьеров второго изомеризационного процесса (Z,E-N¹) нами

было использовано только основное состояние OC¹ (E-изомер).

Квантово-химическое изучение процесса тополимеризации N-[арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонимinov (Ia, б) (процесс Z,E-N¹) показало, что данный процесс также осуществляется по инверсионному механизму. Так, рассчитанное для этого процесса переходное состояние PC² характеризуется близким к линейному расположением атомов триады C=N¹-C [PCN¹C равен 168,05 град. для соединения (Ia), 167,75 град. – для соединения (Iб)] (рис. 2) и имеет плоскость симметрии, которая проходит через атомы N¹-C=N²-S. Отметим, что полученное для состояния PC² значение величины угла C=N¹-C 167,75⁰ (168,05⁰) может свидетельствовать о некотором вкладе вращательного механизма в общий механизм тополимеризации.

Невыгодность вращательного механизма, как основного механизма тополимеризации, подтверждается тем фактом, что ни в одном случае расчеты не показали существования стабильного переходного состояния, соответствующего вращательному механизму изомеризации, то есть такого состояния, в котором связь =N¹-C была бы расположена перпендикулярно плоскости хинониминного фрагмента, а величина валентного угла C=N¹-C оставалось бы в пределах, характерных для хинониминных систем.

Полученные теоретические значения величин барьеров тополимеризации (ΔE⁴ в табл. 1) 33,26 кДж/моль для соединения (Ia) и 31,76 кДж/моль для соединения (Iб) являются довольно малыми и вполне согласуются с тем фактом, что данный процесс не проявляется в спектрах ЯМР хинонмоноимinov (Ia, б).

Как уже отмечалось ранее, N-[арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноимinov являются аналогами N-ароил-1,4-бензохинонмоноимinov. Поскольку величины барьеров выработанной Z,E-изомеризации (тополимеризации) последних, полученные методом динамического ЯМР, известны и лежат в пределах 44–

46 кДж/моль [3], представляло интерес провести сравнение теоретических величин барьеров и механизмов изомеризации N-[арилсульфолимино(фенил)метил]- и N-ароил-1,4-бензохинонмоноиминов. С этой целью нами были проведены расчеты энергий возможных основных и переходных состояний для процесса топомеризации N-бензоил-1,4-бензохинонмоноиминов (IIa, б) (рис. 3, табл. 2).

Согласно расчетам, барьер активации процесса Z,E-изомеризации относительно связи C=N хиноидного ядра хинонмоноиминов (IIa, б) составляет 45–46 кДж/моль, что значительно выше величин барьеров в имидоильных производных (Ia, б) и хорошо согласуется с экспериментальными данными. Геометрические параметры узла C=N¹–C хинонмоноиминов (Ia, б) и (IIa, б) в переходных состояниях ПС² для (Ia, б) и ПС для (IIa, б), полученных в результате оптимизации, отличаются незначительно – в обоих присутствует плоскость симметрии (рис. 2, 3), а валентный угол C=N¹–C равен 164,7⁰ для хинонмоноимина (IIa) и 167,8⁰ – для хинонмоноимина (Ia), что свидетельствует об идентичности механизмов топомеризации рассматриваемых хинонмоноиминов.

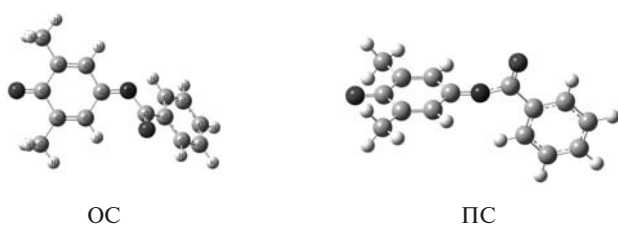
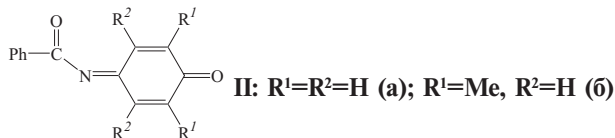


Рис. 3. Основное (ОС) и переходное (ПС) состояния хинонмоноимина (IIб), соответствующие процессу Z,E-изомеризации относительно связи C=N хиноидного ядра

Таблица 2
Энергии основных ОС и переходных ПС состояний и теоретические барьеры активации (ΔE), соответствующие процессу Z,E-изомеризации относительно связи C=N хиноидного ядра, для соединений (IIa,б)



Со-единение	Энергия			
	ОС, ат. ед.	ПС, ат. ед.	ΔE, ат. ед.	ΔE, кДж/моль
IIa	-705,997898	-705,980350	0,017548	46,1
IIб	-784,642660	-784,625385	0,017275	45,4

Как уже отмечалось выше, значительное снижение барьера активации процесса Z,E-изомеризации относительно связи C=N хиноидного ядра хинонмоноиминов (Ia, б) по сравнению с хинон-

моноиминами (IIa, б) может быть обусловлено как особенностями пространственного строения, так и разными электронными эффектами. Сравнительный анализ данных РСА N-бензоил-2,6-диметил- (IIб) [10] и N-[фенилсульфолимино(фенил)метил]-2,6-диметил- (IIб) [7] 1,4-бензохинонмоноиминов показывает, что замена атома кислорода группы ArC=O хинонмоноимина (IIб) на N-арилсульфолиминогруппу ArSO₂N [хинонмоноимин (IIб)] приводит к увеличению угла C=N¹–C на 1 град., укорочению связи C–N¹ на 0,017 Å и уменьшению угла между связью C=N² и плоскостью хиноидного ядра C¹...C⁶ на 10,75 град. [угол между связью C=O и плоскостью хиноидного ядра C¹...C⁶ в хинонмоноимине (IIб) равен 61,19 град.]. Остальные параметры хиноидного ядра и узла C=N¹–C изменяются незначительно. На основании этого можно сделать заключение, что выявленное значительное снижение барьера Z,E-изомеризации относительно связи C=N хиноидного ядра хинонмоноиминов (Ia, б) по сравнению с хинонмоноиминами (IIa, б) (табл. 1, 2) обусловлено, в основном, изменением внутримолекулярных (электронных) взаимодействий.

Согласно квантово-химическим расчетам, замена атома кислорода группы C=O в хинонмоноимине (IIб) на группу ArSO₂N в хинонмоноимине (IIб) приводит к значительному уменьшению энергетической щели между π-связывающей и π-разрыхляющей орбиталями связи C⁷=O²(N²), что обусловлено значительным повышением энергии орбитали π(C⁷=N²) в хинонмоноимине (–927,88 кДж/моль) по сравнению с энергией орбитали π(C⁷=O²) в хинонмоноимине (IIб) (–1110,59 кДж/моль), в то время как энергии орбиталей π(C⁴=N¹) [–931,92 кДж/моль для хинонмоноимина (IIб), –914,41 кДж/моль для хинонмоноимина (IIб)] и π*(C⁴=N¹) [–15,81 кДж/моль для хинонмоноимина (IIб), 1,08 кДж/моль для хинонмоноимина (IIб)] изменяется незначительно. В результате в хинонмоноимине (IIб) значительно уменьшается донорно-акцепторное взаимодействие между орбиталями π*(C⁴=N¹)→π*(C⁷=N²) (4,31 кДж/моль) и значительно увеличивается между орбиталями ν(N)→π*(C⁷=N²) (132,21 кДж/моль) по сравнению с хинонмоноиминном (IIб) (92,80 и 48,86 кДж/моль, соответственно), что и приводит к укорочению связи C⁷–N¹ и уменьшению угла между связью C=N² и плоскостью хиноидного ядра C¹...C⁶, выявленному при анализе данных РСА.

Следует также отметить, что замена атома кислорода группы ArC=O хинонмоноиминов (IIa, б) на более акцепторную группу ArSO₂N [в хинонмоноиминах (Ia,б)] приводит к значительному повышению энергии НЭП атома азота N¹ в основном состоянии, и понижению энергии НЭП атома азота N¹ в переходном состоянии (табл. 3).

В результате значения ΔE , соответствующие разнице энергий НЭП атома азота N^1 в переходном PC^2 и основном OC^1 состояниях для соединений (Ia, б) меньше, чем соответствующие значения ΔE для хинонмоноиминов (IIa, б), что хорошо согласуется с выдвинутым ранее предположением, согласно которому величина барьера инверсии атома азота в первом приближении определяется разностью энергий неподеленной пары атома азота в основном и переходном состояниях [11,12], а достижению переходного состояния и, соответственно, уменьшению барьеров инверсии благоприятствуют факторы, понижающие энергию атомной орбитали неподеленной электронной пары азота в переходном состоянии и/или повышающие ее энергию в основном состоянии [11].

Таким образом, в результате проведенных исследований показано, что в симметрично замещенных в хиноидном ядре N-[арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноиминах возможно протекание только одного инверсионного процесса Z,E-изомеризации относительно связи $C=N^1$ хиноидного ядра (топомеризации). Отсутствие процесса Z,E-изомеризации относительно связи $C=N^2$ имидоильного фрагмента обусловлено большой разностью заселенностей Z- и E-изомеров относительно экзоциклической связи $C=N^2$. Значительное снижение барьера топомеризации рассмотренных N-[арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноиминов по сравнению с N-ароил-1,4-бензохинонмоноиминами обусловлено уменьшением разницы энергий НЭП атома азота N^1 в переходном и основном состояниях, так как замена атома кислорода группы $ArC=O$ в N-ароил-1,4-бензохинонмоноиминах на более акцепторную группу $ArSO_2N$ приводит к повышению энергии НЭП атома азота N^1 в основном состоянии и понижению энергии НЭП атома азота N^1 в переходном состоянии.

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР 1H регистрировались на спектрометре ЯМР VARIAN VXR-300. Точность определения температуры составляла 1К. Квантово-химические расчеты выполнены с использованием пакета Firefly QC [13], который частично основан на исходном коде пакета GAMESS (US) [14]. Поиск переходных состояний осуществлялся с использованием стандартной процедуры оптимизации структуры. Оптимизации основных и возможных переходных состояний по всем геометрическим параметрам выполнены методом DFT (B3LYP) с использованием базисного набора 6-31+G(d). Геометрические параметры оптимизированных структур хорошо согласуются с данными РСА [7].

Конъюгационные и гиперконъюгационные взаимодействия в молекулах исследовались в рамках теории натуральных связывающих орбиталей

(NBO) [15] с применением программы NBO 5.0 [16]. Авторы выражают благодарность за помощь при проведении расчетов коллективу отдела ОРСИКХ ГНУ НТК «Институт монокристаллов» НАНУ и Украинско-американской лаборатории квантовой химии (Харьков, Украина-Джексон, США).

N-[Арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноимины (Ia–г) получены окислением соответствующих N-замещенных п-аминофенолов тетраацетатом свинца в уксусной кислоте по методике [17].

Характеристики и спектральные данные хинонмоноиминов (Ia–г) приведены в работах: (Ia) [17], (Iб) [7], (Iв, г) [8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kessler H., Leibfritz D. Nachweis innermolekularer beweglichkeit durch NMR-spektroskopie. XV. Untersuchungen zur inversion am doppelt gebundenen stickstoffatom am beispiel der tetramethylguanidine // Tetrahedron. – 1970. – Vol.26. – № 8. – P.1805-1820.
2. Просяник А.В. Синтез и стереохимия иминнов и азиридинов: Дисс...докт. хим. наук: 02.00.03. – Днепропетровск: ДХТИ, 1987. – 570 с.
3. Пироженко В.В., Авдеенко А.П. Исследование процессов топомеризации N-ароилбензохинониминнов методом ЯМР // Журн. орган. химии. – 1995. – Т.31. – Вып.11. – С.1686-1691.
4. Выврожденная Z,E-изомеризация 4-арилсульфонилимино-2,6-ди-третбутил-1,4-бензохинонов / В.В. Белов, С.В. Лобань, К.С. Бурмистров, А.В. Просяник // Журн. орган. химии. – 1983. – Т.19. – Вып.4. – С.825-827.
5. Пироженко В.В., Егоров Ю.П. Изучение процессов Z,E-изомеризации N-арилсульфонил и N-арилтио-1,4-бензохинониминнов методом динамического ЯМР // Укр. хим. журн. – 1992. – Т.58. – № 7. – С.567-575.
6. Rieker A., Kessler H. NMR-Studien an chinonanilen Der einfluss para-standiger substituenten im phenylring auf die thermische isomerisierung // Tetrahedron. –1967. – Vol.23. – P.3723-3732.
7. Синтез, рентгеноструктурный анализ и спектры ЯМР 1H , ЯМР ^{13}C N-[N-арилсульфониларил(метил)имидоил]-1,4-бензохинониминнов – производных N-ароил(ацетил)-1,4-бензохинониминнов / А.П. Авдеенко, В.В. Пироженко, Л.М. Ягупольский, И.Л. Марченко // Журн. орган. химии. – 2001. – Т.37. – Вып.7. – С.1043-1051.
8. Галогенирование 2,6(3,5)-диалкил-N-[арилсульфонилимино(фенил)метил]-1,4-бензохинонмоноиминнов и их восстановленных форм / А.П. Авдеенко, С.А. Коновалова, О.П. Леденева, А.А. Санталова // Вопр. химии и хим. технологии. – 2012. – № 4. – С.9-15.
9. Гордон А., Форд Р. Спутник химика: Пер. с англ. – М.: Мир, 1976. – 541 с.
10. Синтез и структура N-арил-(фенокси, бензилен)ацетил-1,4-бензохинонмоноиминнов / Авдеенко А.П., Коновалова С.А., Васильева В.М. и др. // Журн. орган.

химии. – 2012. – Т.48. – Вып.10. – С.1313-1323.

11. *Термическая Z,E-изомеризация иминов. VI. N-Арилсульфонилимины ацетона и 2,6-ди-трет-бутил-1,4-бензохинона* / Просяник А.В., Кольцов Н.Ю., Романченко В.А. и др. // Журн. орган. химии. – 1987. – Т.23. – Вып.2. – С.375-382.

12. *Lehn J.M. Nitrogen inversion. Experiment and theory* // Topics in Current Chemistry. – 1970. – Vol.15. – № 1. – P.311-377.

13. *Granovsky A.A. Firefly version 7.1.G.* – Доступный с: <<http://www.classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>>

14. *General atomic and molecular electronic structure system* / Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., and others // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol.14. – № 11. – P.1347-1363.

15. *Encyclopedia of Computational Chemistry* / Schleyer P.v.R., Schreiner P.R., Allinger N.L., and others. – Chichester: J. Wiley & Sons Inc., 1998. – 1792 p.

16. *NBO 5.0 Program Manual* / Glendening E.D., Badenhoop J.K., Reed A.E. and others. – Madison: Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, 2001. – 146 p.

17. *N-[N-Арен(алкан)сульфонилбензимидаил]-производные n-хининиминов* / А.П. Авдеенко, К.С. Бурмистров, В.Л. Дубина, В.И. Скрипец // Укр. хим. журн. – 1980. – Т.46. – Вып.10. – С.1081-1083.

Поступила в редакцию 27.02.2013