Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Квантовая химия.

Подраздел: Органическая химия.

Регистрационный код публикации: 10-19-3-29

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". http://butlerov.com/readings/ Поступила в редакцию 3 мая 2010 г. УДК 547.794.3:547.781.

Теоретическое исследование механизма трансформации 4-(2,2-диэтоксикарбонил)винил-1,2,3-тиадиазола в 2-этоксифуран-5-тиокарбоксамид

© Прохорова Полина Евгеньевна, Глухарева Татьяна Владимировна и Моржерин Юрий Юрьевич*+

Кафедра технологии органического синтеза. Уральский государственный технический университет – УПИ. Ул. Мира 19, г. Екатеринбург, 620002. Россия. Тел: (343) 375-48-18. E-mail: morzherin@mail.ustu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: трансформация, 1,2,3-тиадиазол, фуран, квантово-химические расчеты.

Аннотация

На основе квантово-химических расчетов установлен наиболее вероятный механизм трансформации нового типа 1,2,3-тиадиазола с участием четырех атомов боковой цепи и потерей молекулы азота, приводящей к образованию производных фурана, содержащих тиоамидную группу.