ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ПЕРЕГРУППИРОВОК α,α-БИСАРИЛАЛЛИЛОВЫХ ЭФИРОВ

Гатауллин А.Р., Ключарева Е.В., Кантор Е.А., Левашова В.И.
Уфимский государственный нефтяной технический университет

Гатауллин А.Р.
Ключарева Е.В.
Кантор Е.А.
Левашова В.И.
Уфимский государственный нефтяной технический университет

В продолжение систематических исследований термических перегруппировок алкениларилoвых эфиров проведены квантовохимические расчеты (AM1, HyperChem [1]) перегруппировки 1,1-бис-[(2´-метил-фенокси)метил]этена, который можно рассматривать как β-арилоксиметилаллиловый эфир фенола. Считается, что подобные бисэфиры в термических условиях претерпевают двойную синхронную внутримолекулярную перегруппировку Кляйзена с образованием соответствующих бисфенолов [2]. Нами изучены возможные маршруты перегруппировки и выбран оптимальный (рис.), исследованы особенности структуры и электронного строения образующихся интермедиатов и переходных состояний.

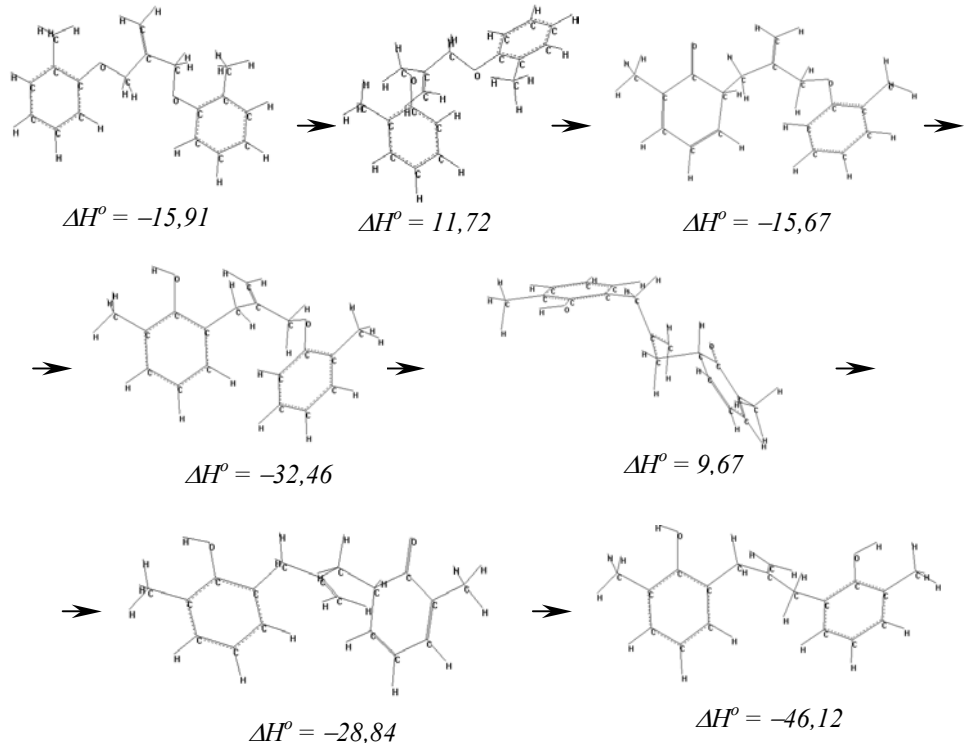

Рис. Маршрут термической перегруппировки 1,1-бис-[(2'-метилфенокси)метил]этена

Согласно экспериментальным [3] и расчетным данным установлено, что термическая перегруппировка бисариловых эфиров является двухступенчатой внутримолекулярной реакцией, обусловленной последовательным превращением О–С-связей исходного эфира.

Литература

1. *HyperChem 6.0 Trial version. www.hyper.com*
2. *Weis F., Isard A.* Transposi de structures a caractere diallyligul. 1. Derives α,α-disbstitues de Isobutene: double transpositionde Cleisen des α,α-bis-aryloxyisobutenes//Bull. Soc. Chim. France.1967.№ 6ю. P. 2033-2038.
3. *Левашова В.И., Краснов В.А., Бунина-Криворукова Л.И.* Термические и каталитические перегруппировки α,α-бисарилаллиловых эфиров // тез.докл. I Регионального совещания по химическим реактивам республик Средней Азии и Казахстана. Душанбе. 1986. С. 79.