

УДК 539.27:149;547.541.513;621.384.66.8

ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКОЕ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ 1,3-БЕНЗОЛДИСУЛЬФОХЛОРИДА© 2007 В.Н. Петрова¹, В.М. Петров², Г.В. Гиричев^{1*}, Х. Оберхаммер³, С.Н. Иванов²¹Ивановский государственный химико-технологический университет²Ивановский государственный университет³Институт физической и теоретической химии, университет г. Тюбинген, Германия

Статья поступила 15 февраля 2006 г.

Выполнено совместное электронографическое ($T = 394(5)$ К) и квантовохимическое (MP2/6-31G**) исследование строения молекулы 1,3-бензолдисульфохлорида (1,3-БДСХ). Установлено, что молекула 1,3-БДСХ имеет два устойчивых конформера, *транс* (I) и *цис* (II), с перпендикулярным расположением плоскостей, содержащих связи S—Cl, относительно плоскости бензольного кольца. Энергия конформера I на 0,13 кДж/моль ниже, чем конформера II. Установлено практически полное отсутствие взаимного влияния сульфохлоридных групп, что находит отражение в совпадении длин связей и величин валентных углов в обоих конформерах. Основные структурные параметры конформеров $r_{hl}(C—H)_{cp} = 1,103(4)$, $r_{hl}(C—C)_{cp} = 1,401(3)$, $r_{hl}(C—S) = 1,767(4)$, $r_{hl}(S=O) = 1,422(3)$, $r_{hl}(S—Cl) = 2,048(4)$ Å, $\angle Cl—S—O = 106,6(2)$, $\angle C—S—Cl = 100,4(5)$, $\angle O—S—O = 123,2(5)^\circ$.

Ключевые слова: молекулярная структура 1,3-бензолдисульфохлорида, конформеры, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия.

Данная работа является продолжением серии электронографических и квантовохимических исследований структуры молекул арилсульфогалогенидов (АСГ) [1—5]. Как отмечалось ранее [5—7], ароматические сульфогалогениды, и сульфохлориды в частности, являются удобными модельными объектами для изучения механизмов реакций нуклеофильного замещения у атома серы сульфониальной группы. Сведения о структуре соединений этого класса важны для понимания особенностей протекания реакций с их участием. Предыдущие работы [1—5] были посвящены исследованию строения молекул 4-метилзамещенных бензолсульфогалогенидов. Было установлено, что им присуща структура с перпендикулярным (4-метилбензолсульфотриид (4-МБСФ) и 4-метилбензолсульфобромид (4-МБСБ) [5]) и близким к перпендикулярному (4-метилбензолсульфохлорид (4-МБСХ) [1]) расположением плоскости, содержащей связь S—Hal, относительно плоскости бензольного кольца.

Ароматические соединения с двумя функциональными сульфохлоридными группами широко используются для получения серосодержащих поликонденсационных полимерных материалов — термостойких полимеров (полисульфонов) [8—11], однако экспериментально структуру молекул такого типа в газовой фазе не изучали.

Настоящая работа посвящена исследованию структуры и конформационных особенностей молекулы 1,3-бензолдисульфохлорида.

* E-mail: girichev@isuct.ru

Т а б л и ц а 1

Условия синхронного электронографического и масс-спектрометрического эксперимента

Параметр	Расстояние "сопло ячейки — фотопластинка", мм	
	$L = 338$	$L = 598$
Ток луча, μA	1,84	0,82
Температура эффузионной ячейки, К	395(5)	394(5)
Ионизирующее напряжение, В	50	50
Время экспозиции, с	60	50
Остаточное давление в дифракционной камере, Торр	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$
Остаточное давление в масс-спектральном блоке, Торр	$9 \cdot 10^{-7}$	$8 \cdot 10^{-7}$
Ускоряющее напряжение, кВ	94	95

Т а б л и ц а 2

Масс-спектры паров 1,3- $\text{C}_6\text{H}_4(\text{SO}_2\text{Cl})_2$, записанные одновременно со съемкой электронограмм ($U_{\text{иониз}} = 50 \text{ В}$)

Ион	m/e	$I_{\text{отн}}, \%$
SO_2^+	64	25
C_6H_4^+	76	100
$\text{C}_6\text{H}_4\text{S}^+$	108	9
$\text{SO}_2^{35}\text{Cl}^+$	99	27
$\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_2^{35}\text{Cl}^+$	175	78
$\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_2^{37}\text{Cl}^+$	177	30
$\text{C}_6\text{H}_4\text{S}_2\text{O}_4^{35}\text{Cl}_2^+$	274	88
$\text{C}_6\text{H}_4\text{S}_2\text{O}_4^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}^+$	276	38
$\text{C}_6\text{H}_4\text{S}_2\text{O}_4^{37}\text{Cl}_2^+$	278	7

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Съемки электронограмм проводили на комплексе аппаратуры ЭМР-100/АПДМ-1 [12, 13], позволяющем осуществлять одновременный электронографический и масс-спектрометрический эксперимент. Испарение препарата происходило из молибденовой эффузионной ячейки при температуре 394(5) К. Для съемок использовали промышленный препарат 1,3-бензолдисульфохлорида, который отмывали от хлористо-водородной кислоты, высушивали и перекристаллизовывали из смеси гексана с пропанолом-2. Температура плавления препарата составила 63,0 °С ($T_{\text{пл}} = 63,5 \text{ °С}$ [14]).

Температуру ячейки измеряли вольфрам-рениевой термопарой ВР-5/20. Съемки электронограмм проводили с двух расстояний сопло ампулы — фотопластинка. Регистрацию дифракционной картины осуществляли на сверхконтрастные диапозитивные пластинки формата 9×12 см чувствительностью 6 ед. ГОСТ. Длину волны электронов определяли по дифракционной картине кристаллического стандарта ZnO. Основные условия проведения электронографического эксперимента приведены в табл. 1.

Съемки электронограмм сопровождалась масс-спектральным контролем состава газовой фазы. В табл. 2 приведен масс-спектр молекулы 1,3-БДСХ, характер которого свидетельствует, что в насыщенных парах при температуре эксперимента присутствовали только молекулы 1,3-БДСХ. Фотометрирование электронограмм проводили на модернизированном фотометре MD-100 (Carl Zeiss, Jena) [15]. Во избежание появления на линии фона $G(s)$ осцилляций, сравнимых по частоте с приведенной молекулярной составляющей интенсивности рассеяния $sM(s)$, при ее выделении из функции полной интенсивности рассеяния $I(s)$ использовали процедуру дифференцирования $G(s)$. Расчет молекулярной составляющей интенсивности рассеяния проведен по формуле $sM(s) = \frac{I(s) - G(s)}{G(s)} \cdot s$.

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Неэмпирические расчеты структуры и силового поля молекулы 1,3-БДСХ проводили методом МР2 в базе 6-31G** с использованием пакета GAUSSIAN-03 [16]. Наличие в молекуле 1,3-БДСХ двух сульфохлоридных групп позволяет предположить существование двух устойчивых, близких по энергии конформеров, отличающихся друг от друга расположением связи S—Cl относительно плоскости бензольного кольца (рис. 1). Это *цис*- и *транс*-конформеры, в

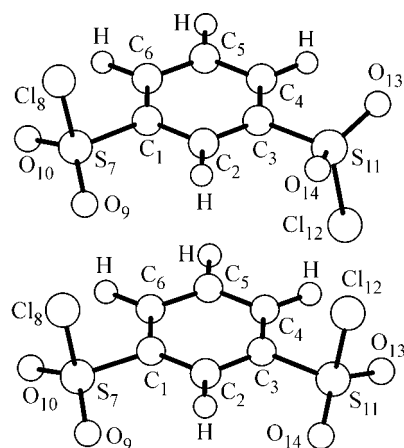


Рис. 1. Модель молекулы 1,3-БДСХ

которых в первом случае связи S—Cl расположены по одну сторону бензольного кольца, а во втором — по его разные стороны. Расчеты подтвердили существование двух устойчивых конформеров с близкими значениями энергии. Энергия *цис*-конформера незначительно (на 0,13 кДж/моль) превышала энергию *транс*-конформера.

СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ

При анализе МНК функции $sM(s)$ для описания геометрической конфигурации обоих конформеров 1,3-БДСХ была выбрана модель, включающая 23 независимых параметра,

Т а б л и ц а 3

Межъядерные расстояния r_a , экспериментальные $l_{\text{эксп}}$ и вычисленные $l_{\text{расч}}$ значения амплитуд колебаний и поправок (за исключением термов для несвязанных атомов, включающих атомы водорода) для *транс*-конформера 1,3-БДСХ (нумерация атомов приведена на рис. 1)

Параметр	r_a	$l_{\text{эксп}}$	$l_{\text{расч}}$	$\Delta r = r_{h1} - r_a$	№ группы	Параметр	r_a	$l_{\text{эксп}}$	$l_{\text{расч}}$	$\Delta r = r_{h1} - r_a$	№ группы
C—H	1,098(4)*	0,062(12)**	0,074	0,005	1	C2—C18	3,639(7)	0,267(16)	0,258	0,032	7
C1—C2	1,400(3)	0,049(1)	0,045	0,001	2	C4—C112	3,639(7)	0,267(16)	0,259	0,033	7
C2—C3	1,399(3)	0,049(1)	0,045	0,001	2	O10—C6	3,809(8)	0,110(5)	0,102	0,033	8
C1—C6	1,398(3)	0,049(1)	0,045	0,002	2	O13—C4	3,816(8)	0,108(5)	0,099	0,033	8
S—O	1,421(3)	0,040(1)	0,035	0,001	2	C5—S7	3,994(8)	0,077(5)	0,068	0,016	8
C—S	1,766(4)	0,059(3)	0,051	0,001	3	C3—S7	4,018(8)	0,077(5)	0,068	0,015	8
Cl—S	2,046(4)	0,055(1)	0,059	0,002	4	O9—C5	4,317(9)	0,148(11)	0,134	0,001	9
C1—C5	2,372(5)	0,053(6)	0,057	0,007	5	O14—C3	4,329(9)	0,150(11)	0,135	0,002	9
C1—C3	2,403(5)	0,052(6)	0,056	0,006	5	C4—S7	4,532(9)	0,085(11)	0,070	0,019	9
C2—C4	2,427(5)	0,053(6)	0,056	0,006	5	C1—C112	4,775(10)	0,258(15)	0,242	0,034	10
C4—C6	2,454(5)	0,053(6)	0,056	0,005	5	C3—C18	4,795(10)	0,260(15)	0,244	0,033	10
O9—O10	2,498(5)	0,055(6)	0,059	0,004	5	O10—C5	4,921(10)	0,123(15)	0,106	0,037	10
O10—C1	2,597(5)	0,074(3)	0,075	0,004	6	O13—C3	4,953(10)	0,120(15)	0,104	0,036	10
O13—C5	2,597(5)	0,073(3)	0,075	0,004	6	O9—O13	5,145(10)	0,320(15)	0,304	−0,051	10
C6—S7	2,718(5)	0,068(3)	0,069	0,008	6	O10—C4	5,160(10)	0,133(15)	0,117	0,024	10
C4—S11	2,726(5)	0,068(3)	0,069	0,008	6	O13—C2	5,172(10)	0,132(15)	0,115	0,023	10
C1—C4	2,775(6)	0,062(3)	0,064	0,008	6	C4—C18	5,288(11)	0,207(10)	0,195	0,030	11
C3—C6	2,825(6)	0,062(3)	0,064	0,007	6	S11—O9	5,410(11)	0,199(10)	0,187	−0,004	11
O10—C18	2,802(6)	0,083(3)	0,084	0,005	6	S7—S11	5,420(11)	0,105(10)	0,094	0,026	11
O13—C112	2,802(6)	0,083(3)	0,084	0,005	6	O9—C112	5,822(12)	0,514(17)	0,516	0,035	12
O9—C6	2,947(6)	0,136(3)	0,137	−0,014	6	S7—C112	6,053(12)	0,366(17)	0,368	0,059	12
O13—C6	2,949(6)	0,136(2)	0,137	−0,014	6	S11—O10	6,480(13)	0,131(17)	0,133	0,062	12
O14—C4	2,956(6)	0,136(2)	0,138	−0,013	6	O9—O14	6,629(13)	0,198(17)	0,200	0,053	12
O10—C2	2,956(6)	0,137(3)	0,138	−0,012	6	O10—C112	6,953(14)	0,537(76)	0,421	0,081	13
C1—C18	2,932(6)	0,100(3)	0,102	0,006	6	C18—C112	7,167(14)	0,539(76)	0,423	0,134	13
						O10—O14	7,463(15)	0,244(76)	0,128	0,090	13

* Погрешности приняты равными $3\sigma_{\text{МНК}}$ для амплитуд и $[(2,5\sigma_{\text{LS}})^2 + (0,002r)^2]^{0,5}$ для межъядерных расстояний.

**Для отдельных расстояний и амплитуд представленные погрешности носят формальный характер, поскольку в анализе МНК между этими параметрами устанавливали фиксированную разницу (см. параграф "Структурный анализ", табл. 4 и последнюю колонку данной таблицы).

Т а б л и ц а 4

Структурные параметры *цис*- и *транс*-конформеров 1,3-С₆Н₄(SO₂Cl)₂, полученные в электронографическом эксперименте и в квантовохимических расчетах (расстояния в Å, углы в град.)

Параметр	<i>транс</i> -Конформер (I)		<i>цис</i> -Конформер (II)	
	ЭГ* <i>r</i> _{h1} -структура	MP2/6-31G** <i>r</i> _e -структура	ЭГ* <i>r</i> _{h1} -структура	MP2/6-31G** <i>r</i> _e -структура
C—H	1,103(4) <i>p</i> ₂	1,082	1,104(4) <i>p</i> ₂	1,082
C—S	1,767(4) <i>p</i> ₃	1,777	1,768(4) <i>p</i> ₃	1,778
C1—C2	1,402(3) <i>p</i> ₁	1,394	1,401(3) <i>p</i> ₁	1,394
C2—C3	1,401(3) (<i>p</i> ₁)	1,395	1,402(3) (<i>p</i> ₁)	1,396
C1—C6	1,399(3) (<i>p</i> ₁)	1,392	1,401(3) (<i>p</i> ₁)	1,392
S—O	1,422(3) <i>p</i> ₄	1,455	1,422(3) <i>p</i> ₄	1,455
S—Cl	2,048(4) <i>p</i> ₅	2,083	2,048(4) <i>p</i> ₅	2,085
∠C2—C1—C6	122,8	122,9	123,0	122,9
∠C1—C2—C3	116,5	116,5	116,2	116,5
∠C3—C4—C5	118,6	118,6	118,6	118,6
∠C4—C5—C6	120,5	120,5	120,5	120,5
∠O—S—Cl	106,6(2) <i>p</i> ₆	107,0	106,6(2) <i>p</i> ₆	107,0
∠S—C1—C2	118,8	118,8	118,8	118,8
∠O—S—O	123,2(5) <i>p</i> ₇	123,2	122,9(6) <i>p</i> ₇	123,3
∠C1—S—C	100,4(5) <i>p</i> ₈	100,1	100,4(5) <i>p</i> ₈	100,0
∠O—S—C	108,8(3) <i>p</i> ₉	108,5	109,0(3) <i>p</i> ₉	108,6
∠C18—S7—C1—C2	90,0	90,0	90,0	90,0
∠C112—S11—C5—C4	-90,0	-90,0	90,0	90,0
мол., %	100		100	
<i>R</i> _f , %	3,25		3,45	

* Погрешности в углах приняты $3\sigma_{\text{МНК}}$; погрешности в межъядерных расстояниях были рассчитаны по уравнению $[(2,5\sigma_{\text{LS}})^2 + (0,002 \cdot r)^2]^{0,5}$; *p*_{*i*} — независимо варьируемый параметр; (*p*_{*i*}) — параметр, уточняющийся в *i*-й группе.

позволяющая учитывать неэквивалентность связей С—С бензольного кольца, а также возможность вращения сульфохлоридных групп относительно связи С—S и их отклонения от биссекториального расположения по отношению к углам C2—C1—C6 и C2—C3—C4 (см. рис. 1). Поскольку длины связей С—С в бензольном кольце близки друг к другу, они не могут быть уточнены при анализе МНК *sM(s)* независимо. Для учета неравноценности связей С—С бензольного кольца в конформерах использовали результаты квантовохимических расчетов, из которых брали различия в величинах межъядерных расстояний $\Delta r(\text{C—C})$ и предполагали, что в ходе анализа МНК разница между соответствующими величинами *r*_{h1}-параметров будет равна расчетным значениям. Величины валентных углов ∠C—C—C и ∠C—C—S приняли равными расчетным и не варьировали. Значения зависимых межъядерных расстояний вычисляли по программе SRINK [17] в рамках *r*_{h1}-структуры в соответствии с формулой $r_{h1} = r_a + (l^2/r - \langle \Delta r \rangle)$. При этом использовали силовое поле, полученное в квантовохимических расчетах. Амплитуды колебаний термов с близкими межъядерными расстояниями уточняли в группах. Разбиение амплитуд колебаний по группам проведено в соответствии с принадлежностью термов к соответствующим пикам на функции *f(r)* и представлено в табл. 3. Для проведения анализа МНК использовали модифицированную программу KCED-35 [18].

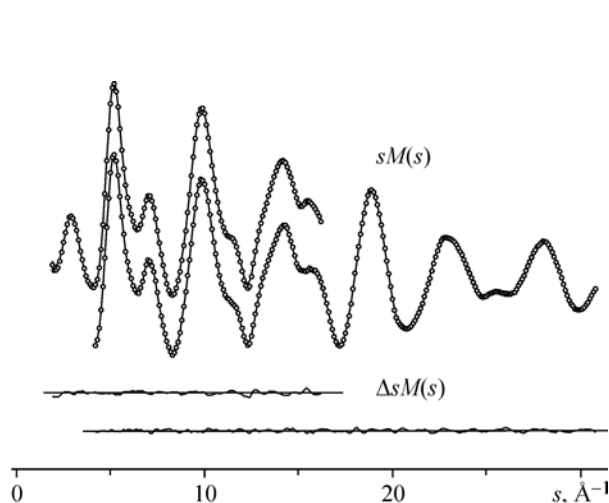


Рис. 2. Экспериментальные (точки) и теоретические (сплошная линия) функции приведенной молекулярной составляющей интенсивности рассеяния $sM(s)$ и кривые разности $\Delta sM(s)$

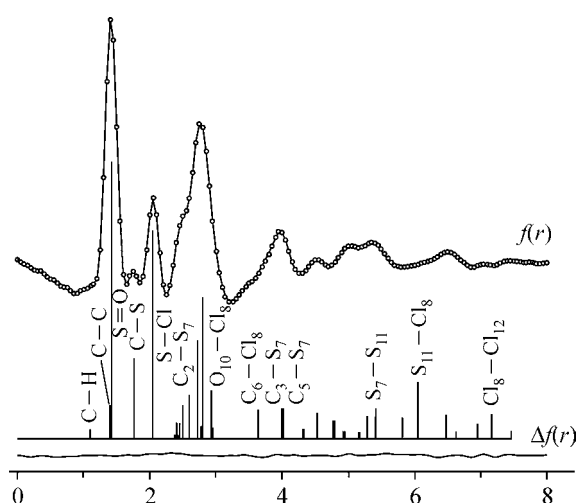


Рис. 3. Экспериментальная (точки), теоретическая (сплошная линия) функции радиального распределения $f(r)$, кривая разности $\Delta f(r)$ и штрих-диаграмма спектра межъядерных расстояний для молекулы 1,3-БДСХ

Анализ МНК проводили в предположении, что в парах присутствует только *цис*- или *транс*-конформер, а также для смеси двух конформеров. Величина фактора рассогласования R_f практически не зависит от состава пара (табл. 4). Это связано с тем, что все параметры, дающие наибольший вклад в функцию $sM(s)$, не зависят от взаимной ориентации сульфохлоридных групп (при условии сохранения перпендикулярного расположения плоскостей, содержащих связи S—Cl), а существенно различающиеся по величине межъядерные расстояния Cl...Cl, O...Cl, O...O дают небольшой вклад в интенсивность рассеяния, что не позволяет определить конформационный состав, основываясь только на электронографических данных. Пять коэффициентов корреляции превышали величину 10,61: $r(S=O)/r(C-C)_{\text{фен}}$ 0,98, $r(C-C)/\angle O-S-C$ 0,65, $r(S=O)/\angle O-S-C$ 0,64, $r(C-C)/l(C-C)_{\text{фен}}$ 0,72, $r(S=O)/l(C-C)_{\text{фен}}$ 0,74.

Структурные параметры конформеров, полученные в электронографическом эксперименте, а также рассчитанные квантовохимически, приведены в табл. 4.

Экспериментальные функции $sM(s)$ сопоставлены с их теоретическими аналогами на рис. 2. На рис. 3 показана функция радиального распределения.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ МНК функции $sM(s)$ показывает, что электронографические данные не позволяют определить соотношение *цис*- и *транс*-конформеров. На рис. 4 представлена зависимость фактора рассогласования R_f от состава пара. Формально минимум R_f -фактора достигается исключительно для *транс*-конформера. Однако, согласно критерию Гамильтона [19], даже при уровне значимости 0,25 неопределенность в концентрации этой формы очень велика и составляет 80 %.

Согласно квантовохимическим расчетам в газовой фазе при температуре выполненного электронографического эксперимента (394 К) равновесный пар должен содержать равные количества *цис*- и *транс*-конформера. Этот результат не противоречит электронографическим данным.

Экспериментальные и расчетные величины структурных параметров молекулы 1,3-БДСХ (см. табл. 4), характеризующие конфигурацию бензольного кольца, хорошо согласуются между собой. В то же время полученные в квантовохимических расчетах величины межъядерных расстояний C—S, S—O и, особенно, S—Cl существенно превышают экспериментальные значения.

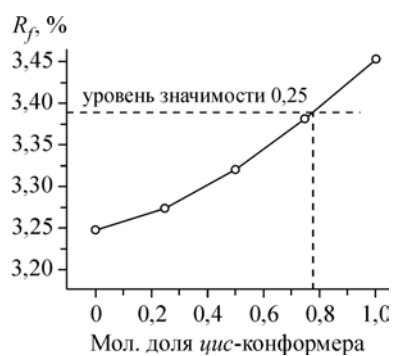


Рис. 4. График зависимости R_f -фактора от мольной доли *цис*-конформера

Т а б л и ц а 5

Сравнение структурных параметров молекулы 1,3-БДСХ с имеющимися в литературе данными для сходственных молекул (межъядерные расстояния в Å, углы в град.)

Параметр	1,3- $C_6H_4(SO_2Cl)_2$ <i>транс</i> -конформер	$C_6H_5SO_2Cl$	4- $CH_3C_6H_5SO_2Cl$
	Настоящая работа	[20]	[1]
$r_a(C-H)^*$	1,103(8)	1,140(31)	1,103(27)
$r_a(C-C)^*$	1,399(3)	1,403(10)	1,403(7)
$r_a(C-S)$	1,764(4)	1,764(9)	1,758(6)
$r_a(S-O)$	1,422(3)	1,417(12)	1,419(3)
$r_a(S-Cl)$	2,046(4)	2,047(8)	2,049(5)
$\angle CSCI$	100,3(5)	100,9(20)	101,3(6)
$\angle CISO$	106,6(1)	105,5(18)	106,9(3)
$\angle OSO$	123,1(5)	122,5(36)	120,5(9)
$\angle CSO$	108,9(3)	110,0(25)	110,5(6)
$\angle CISCC$	90	75,3(50)	83

* Усредненные значения.

Известно, что в расчетах по методу MP2 с малыми и средними базами предсказываемая длина связей $S-X$, где X является электроотрицательным атомом типа Cl, O или F, завышается на 0,03—0,08 Å. В расчетах по методу DFT/B3LYP завышение составляет еще большую величину. В частности, при уровне расчета B3LYP/6-31G** длина связей $S-Cl$ в исследуемой молекуле получается равной 2,122 Å, в то время как экспериментальное значение $r_{hl}(S-Cl)$ было найдено равным 2,048(4) Å. Экспериментальные и расчетные величины валентных углов, характеризующих структуру сульфохлоридных групп, согласуются между собой.

В табл. 5 сравниваются структурные параметры молекулы *мета*-бензолдисульфохлорида и ряда исследованных ранее ароматических сульфогалогенидов. Как следует из таблицы, средняя величина межъядерного расстояния $C-C$ мало зависит от введения в бензольное кольцо как одной [20], так и двух сульфохлоридных групп и остается близкой к расстоянию $C-C$ в молекуле бензола. Более сильное влияние оказывает положение заместителей на величины валентных углов $\angle C-C-S$. Как показывают расчеты MP2/6-31G**, величина валентного угла при электрооакцепторном заместителе (SO_2Cl -группа) увеличивается от 120 до 122,9°. Величина валентного угла $\angle C1-C6-C5$ уменьшается до 116,5°, величина угла $\angle C2-C3-C4$ увеличивается до 120,5°. В *мета*-положении сульфохлоридные группы оказывают малое взаимное влияние. Поэтому плоскости, содержащие связи $S-Cl$, сохраняют перпендикулярное расположение относительно плоскости бензольного кольца, характерное для незамещенных и *пара*-замещенных бензолсульфогалогенидов [1—3, 5, 20]. Также и связи $C-S$ практически не отклоняются от биссекториального расположения относительно углов $\angle C-C(S)-C$, характерного для *пара*-замещенных бензолсульфогалогенидов [1—3, 5, 20]. Сравнение параметров сульфохлоридной группы в молекуле 1,3-БДСХ с соответствующими величинами структурных параметров, полученных для молекул БСХ [20] и 4-МБСХ [1], также показывает хорошее согласие для всех величин межъядерных расстояний и валентных углов.

Как уже отмечалось, энергии *цис*- и *транс*-конформеров молекулы 1,3-БДСХ близки. В то же время барьер вращения сульфохлоридной группы довольно высок и составляет 24 кДж/моль. Величину барьера внутреннего вращения рассчитывали как разницу между энергией молекулы при перпендикулярном расположении плоскостей, содержащих связи $S-Cl$, и энергией молекулы при расположении связи $S-Cl$ одной из групп SO_2Cl в плоскости бензольного кольца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование позволяет сделать заключение, что при температуре выполненного электронографического эксперимента ($T = 394(5)$ К) в парах содержатся *транс*- и *цис*-конформеры в равных количествах. Не связанные с ориентацией сульфохлоридных групп структурные параметры конформеров совпадают в пределах погрешности эксперимента, что свидетельствует о слабом влиянии этих групп друг на друга. В то же время влияние сульфоалогенидных групп на бензольное кольцо весьма существенно и зависит от взаимной ориентации этих групп.

Работа выполнена в рамках российско-германского сотрудничества при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и DFG (гранты 05-03-04003_ННИО_а и 436 RUS 113/69).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Петров В.М., Петрова В.Н., Кислов В.В. и др. // Журн. структур. химии. – 1999. – **40**, № 4. – С. 653 – 664.
2. Kislov V.V., Petrov V.M., Noskov S.Y. et al. // Internet J. Chem. – 1999. – **2**, art. 9.
3. Кислов В.В., Иванов С.Н., Петров В.М. // Журн. структур. химии. – 2000. – **41**, № 5. – С. 914 – 923.
4. Кислов В.В., Иванов С.Н. // Журн. общ. химии. – 2000. – **70**, вып. 2. – С. 208 – 216.
5. Петров В.М., Петрова В.Н., Кислов В.В. и др. // Журн. структур. химии. – 2000. – **41**, № 6. – С. 1137 – 1148.
6. Литвиненко Л.М., Савелова В.А., Соломойченко Т.Н., Заславский В.Г. Структура, реакционная способность органических соединений и механизмы реакций. – Киев: Наукова думка, 1980. – С. 3 – 68.
7. Haughton A.R., Laird R.M., Spence M.J. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. II. – 1975. – N 6. – P. 637 – 643.
8. Бюллер К.У. Тепло- и термостойкие полимеры / Под ред. Я.С. Выгодского – М.: Химия, 1984. – С. 248 – 251.
9. Москвичев Ю.А., Сапунов В.А., Миронов Г.С. // Журн. приклад. химии. – 1980. – **53**, вып. 7. – С. 619 – 624.
10. Москвичев Ю.А., Тимошенко Г.Н., Григоричев А.К. и др. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 1996. – **39**, вып. 3. – С. 82 – 84.
11. Тарасов А.В. Синтезы и химические превращения моно- и дихлорангидридов сульфо- и сульфокарбоновых кислот ароматического ряда. – Автореф. дис. ... докт. хим. наук. – Ярославль: ЯГТУ, 2003.
12. Гиричев Г.В., Уткин А.Н., Ревичев Ю.Ф. // Приборы и техника эксперимента. – 1984, № 2. – С. 457 – 459.
13. Гиричев Г.В., Шлыков С.А., Ревичев Ю.Ф. // Там же. – 1986. – № 4. – С. 167 – 169.
14. Сьютер Ч. Химия органических соединений серы. Ч. 2. – М.: Изд. ИНЛИТ, 1951.
15. Гиричев Е.Г., Захаров А.В., Гиричев Г.В., Базанов М.И. // Известия вузов. Текстиль. пром-ть. – 2000. – № 2. – С. 142 – 146.
16. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery Jr. J.A.,reven T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Scalmani G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M.W., Gonzalez C., Pople J.A. – Gaussian 03, Revision B. 04. – Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
17. Sipachev V.A. // J. Mol. Struct. – 2001. – **567–568**. – P. 67; Sipachev V.A. // Ibid. – 1985. – **121**. – P. 143; Sipachev V.A. / In: Advances in Molecular Structure Research / Eds. I. Hargittai, M. Hargittai. – N. Y.: JAI Press, 1999. – **5**. – P. 263.
18. Andersen B., Seip H.M., Strand T.G., Stolevik R. // Acta Chem. Scand. – 1969. – **23**. – P. 3224.
19. Hamilton W.C. // Acta Crystallogr. – 1965. – **18**. – P. 502.
20. Brunvoll J., Hargittai I. // J. Mol. Struct. – 1976. – **30**. – P. 361 – 378.