

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА  
*хімічний факультет*

НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ШЕВЧЕНКА  
*хімічна комісія*



Присвячується 75 річчю від дня народження  
**професора Оксани Іванівни Бодак**

*ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ*

**XVI НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ  
«ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2017»**

28-31 травня 2017 року

ЛЬВІВ – 2017

Збірник наукових праць: XVI наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2017». Львів, 28-31 травня 2017 року – Львів: Видавничий центр Львівського національного університету імені Івана Франка, 2017. – 315 с.

В збірнику опубліковані матеріали фундаментальних і прикладних наукових досліджень в галузі неорганічної, аналітичної, органічної, біоорганічної, медичної, фізичної хімії, хімії довкілля, хімічної технології, матеріалознавства та наноструктурованих систем.

За зміст тез відповідальність несуть автори.

#### ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНИХ ПОЗНАЧЕНЬ СЕКЦІЙ:

П – пленарні доповіді;

У – усні доповіді;

О – органічна, біоорганічна та медична хімія;

Ф – фізична хімія;

М – матеріалознавство та наноструктуровані системи;

Н – неорганічна хімія;

А – аналітична хімія;

Д – хімія довкілля;

Т – хімічна технологія.

# СТЕРЕОХІМІЯ ТА РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ СУЛЬФОХЛОРИДІВ АНІЛІДІВ СУЛЬФОКИСЛОТ З ЕКРАНОВАНИМИ СУЛЬФОНІЛАМІДНИМИ ЗАМІСНИКАМИ

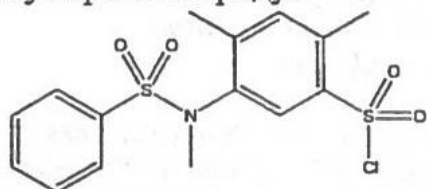
Людмила Рубльова<sup>1</sup>, Борис Михалічко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Кафедра загальної хімії, Донецький національний технічний університет

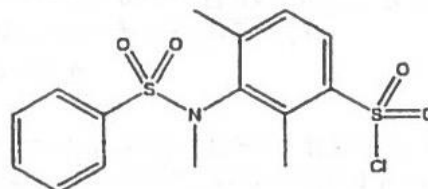
<sup>2</sup>Кафедра процесів горіння і загальної хімії, Львівський державний університет безпеки життєдіяльності

e-mail: mykhalitchko@email.ua

Проведено синтез і рентгеноструктурне дослідження двох нових стерично утруднених ізомерів диметил[метил(фенілсульфоніл)аміно]-бензенсульфонілхлориду:



(1)



(2)

Результати структурних досліджень виявили низку цікавих особливостей молекулярної структури для **1** та **2**. Обидва ізомери організовані як молекулярні кристали з розгалуженою системою міжмолекулярних водневих зв'язків типу (C)H...O та (C)H...Cl (H...O знаходяться в межах 2.27(3)–2.76(2) Å). Полярні групи (–SO<sub>2</sub>Cl і –SO<sub>2</sub>–) цих молекул формують внутрішньомолекулярні водневі зв'язки (C)H...O(S) типу. Поєднання експериментального (рентгеноструктурний аналіз) і теоретичного (квантово-хімічні обчислення *ab initio*) підходів дало змогу пояснити специфічні кінетичні риси реакційності субстратів **1** і **2** в умовах сольволізу. Молекула **2** характеризується більш жорсткою структурою і видовженим зв'язком S–Cl (2.147(1) Å) у порівнянні з **1** (S–Cl 2.039(1) Å), що сприяє можливій реалізації «фронтальної» атаки нуклеофіла і виникненню неklasичного перехідного стану (ПС) S<sub>N</sub>2-типу. Це відображається на величинах термодинамічних параметрів ПС і проявляється в підвищенні реакційності сполуки **2**. Так, для нейтрального гідролізу в 70% водному розчині діоксану маємо: для **1** (5-[N(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>SO<sub>2</sub>)-NMe]-2,4-Me<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>Cl) –  $k_{\text{сф}} = 2.17 \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$  (323 K),  $\Delta H^{\ddagger} = 49.5 \text{ кДж/моль}$ ,  $-\Delta S^{\ddagger} = 186.0 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}$ ; для **2** (3-[N(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>SO<sub>2</sub>)-NMe]-2,4-Me<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>Cl) –  $k_{\text{сф}} = 3.79 \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$  (323 K),  $\Delta H^{\ddagger} = 66.8 \text{ кДж/моль}$ ,  $-\Delta S^{\ddagger} = 130.7 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}$ .