

УДК 547.567.5

С.А. Коновалова^а, А.П. Авдеенко^а, А.Г. Сергеева^а, С.А. Гончарова^б, М.В. Полищук^а

РОДАНИРОВАНИЕ N-АРИЛАМИНОКАРБОНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОНМОНОИМИНОВ

^аДонбасская государственная машиностроительная академия, г. Краматорск

^бСумский государственный университет

Ранее высказано предположение, что при роданировании N-замещенных 1,4-бензохинонмоноиминов 1,4-присоединение роданид-иона атомом серы характерно для хинонмоноиминов с низкой энергией НСМО, а атомом азота – для хинонмоноиминов с высокой энергией НСМО. При роданировании N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов получены 1,3-бензоксатиол-2-оны и 2-имино-1,3-бензоксатиолы, которые образуются через первоначальное 1,4-присоединение роданид-иона атомом серы, причем 1,3-бензоксатиол-2-оны являются продуктами гидролиза 2-имино-1,3-бензоксатиолов. Согласно квантово-химическим расчетам N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноимины имеют более низкие значения НСМО, чем N-ацетил- и N-фенилацетил-1,4-бензохинонмоноимины, при роданировании которых ранее получены продукты, образующиеся через присоединение роданид-иона как атомом азота, так и атомом серы. Это подтверждает, что ключевым фактором при роданировании N-замещенных 1,4-бензохинонмоноиминов является энергия НСМО исходного хинонмоноимина, при этом присоединение роданид-иона атомом серы протекает при орбитальном контроле.

Ключевые слова: N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноимины, 1,4-присоединение, роданид калия, энергия НСМО, орбитальный контроль.

Введение

Роданид-анион $[\text{NCS}]^-$ обладает двумя нуклеофильными центрами: атомом серы и атомом азота и является мягким нуклеофилом. В зависимости от строения исходного реагента и условий проведения реакции присоединение роданид-иона может протекать атомом азота с образованием изотиоцианатов ($-\text{NCS}$) или атомом серы с образованием тиоцианатов ($-\text{SCN}$) [1,2]. Для N-замещенных 1,4-бензохинониминов с низким значением энергии НСМО [N-ароил-(сульфонил-, бензимидаил-) производные] характерно присоединение роданид-иона атомом серы при орбитальном контроле [3], с высоким – атомом азота при зарядовом контроле {N-(4-метилфенил)-1,4-бензохинонмоноимин [4]}. Затем образовавшиеся промежуточные продукты 1,4-присоединения подвергаются циклизации с образованием соответствующих 1,3-бензоксатиол-2-онов и 1,3-бензоксазол-2-тионов. Для N-ацетил- и N-[арилсульфонилимино(метил)метил]-1,4-бензохинонмоноимин, имеющих промежуточное значение энергии НСМО, получены конечные продукты, образующиеся по обеим схемам [5].

Ранее синтезированы новые N-замещенные 1,4-бензохинонмоноимины – N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноимины [6,7]. Исследованы их реакции с арилсульфинатами натрия [8], азидом натрия [9], спиртами [7]. Установлено, что наличие группы NH в структуре N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов существенным образом влияет на их реакционную способность [7–9]. Роданирование N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов ранее не исследовалось.

Результаты и их обсуждение

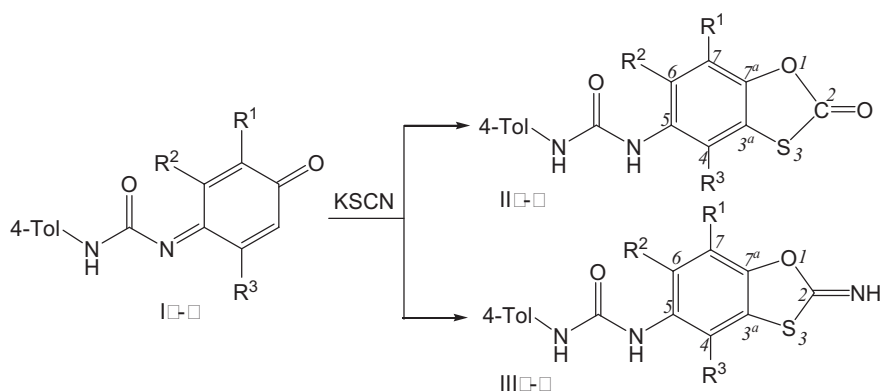
Реакцию N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов (Iа–д) с роданидом калия проводили в ледяной уксусной кислоте с соотношением реагентов 1:2. Анализ осадков, полученных после полного осаждения водой реак-

ционной смеси, показал, что они содержали по два продукта – 5-(ариламинокарбонил)амино-1,3-бензоксатиол-2-оны (IIа–д) и 2-имино-5-ариламинокарбониламино-1,3-бензоксатиолы (IIIа–д) с соотношениями 51:49 (IIа:IIIа), 70:30 (IIб:IIIб), 61:39 (IIв:IIIв), 52:48 (IIг:IIIг), 73:27 (IIд:IIIд) (схема). Соединения (IIа–д) и (IIIа) удалось выделить в индивидуальном виде после нескольких перекристаллизаций.

Следует отметить, что соединения (IIа–д, IIIа–д) образуются через присоединение роданид-иона атомом серы, причем соединения (IIа–д) являются продуктами гидролиза соединений (IIIа–д). Аналоги последних соединений ранее были получены только при роданировании N-трифторметилсульфонил-1,4-бензохинонмоноиминов [10]. Возможность обнаружения соединений (IIIа–д) связана, вероятно, с их большей устойчивостью по отношению к гидролизу, чем в случае N-арилсульфонил- и N-ацил-1,4-бензохинонмоноиминов [3,5].

Строение соединений (IIа–д, IIIа–д) установлено на основании данных ЯМР ^1H , ЯМР ^{13}C , ИК-спектров и элементного анализа. Для спектров ЯМР ^1H соединений (IIIа–д) характерно наличие уширенного синглета протона группы $\text{C}=\text{NH}$ с области 9,54–9,86 м.д. и сдвиг сигналов протонов H^4 , H^6 и H^7 в более сильное поле по сравнению с сигналами аналогичных протонов соединений (IIа–д) (табл. 1). Согласно данным спектров ЯМР ^{13}C сигнал атома углерода C^2 соединения (IIб) проявляется при 167,90 м.д., что характерно для группы $\text{C}=\text{O}$ 1,3-бензоксатиол-2-онов, а соединения (IIIа) – при 162,22 м.д., что характерно для группы $\text{C}=\text{NH}$ 2-имино-1,3-бензоксатиолов (табл. 2).

В ИК-спектре соединения (IIб) присутствует поглощение в области 1758–1728, соответствующее группе $\text{C}=\text{O}$ 1,3-бензоксатиол-2-онов, и в области 3270–3250 cm^{-1} , соответствующее группе NH. В ИК-спектре соединения (IIIа) присутствует поглощение в областях 1650–1620,



$\text{R}^1=\text{Me}$, $\text{R}^2=\text{R}^3=\text{H}$ (а), $\text{R}^1=\text{R}^3=\text{Me}$, $\text{R}^2=\text{H}$ (б), $\text{R}^1=\text{H}$, $\text{R}^2=\text{R}^3=\text{Me}$ (в), $\text{R}^1=i\text{-Pr}$, $\text{R}^2=\text{H}$, $\text{R}^3=\text{Me}$ (г), $\text{R}^1=\text{Me}$, $\text{R}^2=\text{H}$, $\text{R}^3=i\text{-Pr}$ (д).

Схема

Таблица 1

Данные спектров ЯМР ^1H соединений (Па–д, Ша–д)

Номер соединения	Химический сдвиг, δ , м.д.		
	протонов фрагмента 4-Tol	протонов ядра 1,3-бензоксатиол-2-она или 2-имино-1,3-бензоксатиола	протонов групп NH
Па	2,24 с (3H, Me), 7,09 д (2H, J 8,4 Гц), 7,32 д (2H, J 8,4 Гц)	2,32 с (3H, Me ⁷), 7,24 д (1H, H ⁴ , J 2,1 Гц), 7,70 д (1H, H ⁶ , J 2,1 Гц)	8,60 с (1H, NH), 8,73 с (1H, NH)
Пб	2,24 с (3H, Me), 7,08 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	2,19 с (3H, Me ⁷), 2,30 с (3H, Me ⁷), 7,62 с (1H, H ⁶)	8,05 с (1H, NH), 8,84 с (1H, NH)
Пв	2,23 с (3H, Me), 7,06 д (2H, J 8,4 Гц), 7,32 д (2H, J 8,4 Гц)	2,18 с (3H, Me ⁷), 2,27 с (3H, Me ⁶), 7,31 с (1H, H ⁷)	7,84 с (1H, NH), 8,67 уш.с (1H, NH)
Пг	2,24 с (3H, Me), 7,07 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	1,24 д (6H, 2Me, <i>i</i> -Pr), 2,19 с (3H, Me ⁴), 3,06–3,21 м (1H, CH, <i>i</i> -Pr), 7,68 с (1H, H ⁶)	8,09 с (1H, NH), 8,85 с (1H, NH)
Пд	2,24 с (3H, Me), 7,07 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	1,24 д (6H, 2Me, <i>i</i> -Pr), 2,32 с (3H, Me ⁷), 3,25–3,40 м (1H, CH, <i>i</i> -Pr), 7,44 с (1H, H ⁶)	8,10 с (1H, NH), 8,86 с (1H, NH)
Ша	2,24 с (3H, Me), 7,08 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	2,26 с (3H, Me ⁷), 7,09 д (1H, H ⁶ , J 2,1 Гц), 7,49 д (1H, H ⁴ , J 2,1 Гц)	8,57 с (1H, NH), 8,59 с (1H, NH), 9,54 уш.с (1H, C=NH)
Шб	2,24 с (3H, Me), 7,08 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	2,12 с (3H, Me ⁴), 2,25 с (3H, Me ⁷), 7,42 с (1H, H ⁶)	7,94 с (1H, NH), 8,79 с (1H, NH), 9,64 уш.с (1H, C=NH)
Шв	2,23 с (3H, Me), 7,08 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	2,20 с (3H, Me ⁴), 2,26 с (3H, Me ⁶), 7,06 с (1H, H ⁷)	7,77 с (1H, NH), 8,82 с (1H, NH), 9,70 уш.с (1H, C=NH)
Шг	2,24 с (3H, Me), 7,07 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	2,12 с (3H, Me ⁴), 1,22 д (6H, 2Me, <i>i</i> -Pr), 3,06–3,21 м (1H, CH, <i>i</i> -Pr), 7,47 с (1H, H ⁶)	7,97 с (1H, NH), 8,79 с (1H, NH), 9,63 уш.с (1H, C=NH)
Шд	2,24 с (3H, Me), 7,07 д (2H, J 8,4 Гц), 7,33 д (2H, J 8,4 Гц)	1,16 д (6H, 2Me, <i>i</i> -Pr), 2,14 с (3H, Me ⁷), 3,25–3,40 м (1H, CH, <i>i</i> -Pr), 7,34 с (1H, H ⁶)	8,02 с (1H, NH), 8,70 с (1H, NH), 9,86 уш.с (1H, C=NH)

Таблица 2

Данные спектров ЯМР ^{13}C соединений (Пб, Ша)

Номер соединения	Химический сдвиг, δ , м.д.	
	атомов углерода фрагмента 4-Tol	атомов углерода ядра 1,3-бензоксатиол-2-она или 2-имино-1,3-бензоксатиола
Пб	20,33 (Me), 117,96 (C ^{2,6}), 128,89 (C ^{3,5}), 136,95 (C ⁴), 134,21 (C ¹)	15,34 (Me), 16,49 (Me), 118,89 (C ^{3a}), 120,63 (C ⁶), 122,18 (C ⁷), 122,87 (C ⁴), 130,30 (C ⁵), 141,65 (C ^{7a}), 152,48 (C=O), 167,90 (C ^{2=O})
Ша	20,26 (Me), 118,27 (C ^{2,6}), 129,10 (C ^{3,5}), 137,00 (C ⁴), 135,90 (C ¹)	15,59 (Me), 109,60 (C ⁴), 113,28 (C ⁶), 120,52 (C ^{3a}), 123,39 (C ⁷), 130,64 (C ⁵), 143,69 (C ^{7a}), 152,55 (C=O), 162,22 (C=NH)

3270–3250 и 3350–3310 cm^{-1} , соответствующее группам C=O, NH, C=NH, и отсутствует поглощение в области 1800–1700 cm^{-1} , соответствующее группе C=O 1,3-бензоксатиол-2-онов.

Согласно квантово-химическим расчетам (табл. 3) N-фениламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноимин (X=PhNHCO) имеет более низкое значение энергии НСМО, чем N-ацетил- (X=MeCO) и N-фенилацетил- (X=PhCH₂CO) 1,4-бензохинонмоноимины (табл. 3), при роданировании которых ранее наряду с 1,3-бензоксатиол-2-онами, образующимися через первоначальное присоединение роданид-иона атомом серы, были получены также 1,3-бензоксазол-2-тионы, образующиеся через первоначальное

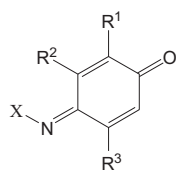
присоединение роданид-иона атомом азота [5,11]. Для N-фенилсульфонил-1,4-бензохинонмоноиминов (X=PhSO₂), имеющих еще более низкие значения энергии НСМО, ранее были получены только продукты, образующиеся через первоначальное присоединение роданид-иона атомом серы [3].

Роданид-анион обладает двумя нуклеофильными центрами – атомом азота и атомом серы. Согласно квантово-химическим расчетам атом азота роданид-аниона обладает большим отрицательным зарядом (–0,575) и меньшей плотностью локализации ВЗМО (0,147), тогда как атом серы, наоборот, имеет большую плотность локализации ВЗМО (0,546) и меньший

отрицательный заряд ($-0,461$).

Таблица 3

Энергия НСМО 1,4-бензохинонмоноиминов



X	Энергия НСМО, кДж/моль	
	R ¹ =Me, R ² =R ³ =H	R ¹ =H, R ² =R ³ =Me
PhCH ₂ CO	-347,17	-341,21
MeCO	-352,84	-341,58
PhNHCO	-359,22	-345,81
PhSO ₂	-371,73	-366,52

На основании вышесказанного можно предположить, что роданирование N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов протекает при орбитальном контроле, поэтому выделены только продукты, образующиеся через первоначальное присоединение роданид-иона атомом серы.

Выводы

Результаты роданирования N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов находятся в соответствии с выдвинутым ранее предположением, согласно которому присоединение роданид-иона атомом серы идет при орбитальном контроле и характерно для N-замещенных 1,4-бензохинонмоноиминов с низким значением энергии НСМО.

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР ¹H и ¹³C измерены на приборе VXR-300 с рабочей частотой 300 и МГц относительно ТМС в ДМСО-d₆. ИК-спектры получены на спектрометре UR-20 в таблетках KBr. Образование продуктов реакции и их чистоту контролировали с помощью ТСХ на пластинках Silufol UV-254. В качестве растворителя использовали ацетон, элюент спирт-хлороформ (1:10) для соединений (IVa–в – VIIa–в), элюент бензол-гексан (10:1) для соединений (IXa–в – XIa–в). Проявление пластинок проводили УФ светом.

Квантово-химические расчеты проводились с использованием программы пакета Firefly QC [12], который частично основан на исходном коде пакета GAMESS (US) [13]. Молекулярная структура исследуемых соединений была рассчитана в рамках теории функционала плотности, с применением функционала B3LYP. Для расчетов использовался стандартный базисный набор 6-31+G(d).

N-Ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноимины (Ia–e) получены по методикам, описан-

ным в работах [6,7].

Взаимодействие хинонмоноиминов (Ia–e) с роданидом калия

К раствору 2 ммоль хинонимина в 20 мл ледяной уксусной кислоты прибавляли 4 ммоль роданида калия, перемешивали и оставляли на 12–14 ч. После обесцвечивания в реакционную массу добавляли воду до полного осаждения. Осадок отфильтровывали, промывали теплой водой и перекристаллизовывали из уксусной кислоты.

1-(7-Метил-2-оксобензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIa)

Выход 51%, T_{пл.} 216–218°C. Найдено, %: N 8,61, 8,79, S 9,99, 10,25. C₁₆H₁₄N₂O₃S. Вычислено, %: N 8,91, S 10,20.

1-(4,7-Диметил-2-оксобензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIб)

Выход 70%, T_{пл.} 243–245°C. Найдено, %: N 8,16, 8,42, S 9,27, 9,51. C₁₇H₁₆N₂O₃S. Вычислено, %: N 8,53, S 9,76.

1-(4,6-Диметил-2-оксобензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIв)

Выход 61%, T_{пл.} 220–222°C. Найдено, %: N 8,61, 8,79, S 9,67, 9,88. C₁₇H₁₆N₂O₃S. Вычислено, %: N 8,53, S 9,76.

1-(4-Метил-7-изопропил-2-оксобензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIг)

Выход 52%, T_{пл.} 205–207°C. Найдено, %: N 7,81, 8,99, S 9,05, 9,15. C₁₉H₂₀N₂O₃S. Вычислено, %: N 7,86, S 9,00.

1-(7-Метил-4-изопропил-2-оксобензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIд)

Выход 73%, T_{пл.} 203–205°C. Найдено, %: N 7,69, 7,82, S 8,95, 9,09. C₁₉H₂₀N₂O₃S. Вычислено, %: N 7,86, S 9,00.

1-(2-Имино-7-метилбензо[d][1,3]оксатиол-5-ил)-3-(4-толил)мочевина (IIIa)

Выход 49%, T_{пл.} 185–187°C. Найдено, %: N 13,48, 13,59, S 10,11, 10,35. C₁₆H₁₅N₃O₂S. Вычислено, %: N 13,41, S 10,23.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Loos R., Kobayashi S., Mayr H. Ambident reactivity of the thiocyanate anion revisited: can the product ratio be explained by the hard soft acid base principle // J. Am. Chem. Soc. – 2003. – Vol.125. – P.14126-14132.
- Patai S. The chemistry of cyanates and their thio derivatives. – 1977. – Part 2. – P.823-828.
- Роданирование N-арилсульфонил-, N-ароил- и N-[(N-арилсульфонил)-бензимидаил]-1,4-бензохинонмоноиминов / Авдеенко А.П., Пироженко В.В., Коновалова С.А. и др. // Журн. орган. химии. – 2009. – Т.45. – Вып.3. – С.419-426.
- Взаимодействие N-(п-толил)-1,4-бензохинонмоноимина с роданистоводородной кислотой / Бурмистров К.С.,

Торопин Н.В., Бурмистров С.И. и др. // Журн. орган. химии. – 1992. – Т.28. – С.1900-1904.

5. *Взаимодействие* N-арил-, N-ацетил и N-[арилсульфонилимино(метил)метил]производных 1,4-бензохинонмоноимина с роданидом калия / Коновалова С.А., Авдеенко А.П., Леденева О.П. и др. // Журн. орган. химии. – 2014. – Т.50. – Вып.5. – С.650-660.

6. *Синтез и структура* N-арил(алкил)аминокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов Авдеенко А.П., Коновалова С.А., Сергеева А.Г. и др. // Журн. орган. химии. – 2008. – Т.44. – Вып.12. – С.1791-1798.

7. *Взаимодействие* N-алкил(арил)аминокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов со спиртами / Авдеенко А.П., Коновалова С.А., Сергеева А.Г. и др. // Журн. орган. химии. – 2009. – Т.45. – Вып.5. – С.692-698.

8. *Взаимодействие* N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов с арилсульфинатами натрия / А.П. Авдеенко, С.А. Коновалова, А.Г. Сергеева, М.В. Коновалова // *Вопр. химии и хим. технологии.* – 2010. – № 2. – С.9-17.

9. *Взаимодействие* N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов с азидом натрия / Коновалова С.А., Авдеенко А.П., Сергеева А.Г. и др. // Журн. орган. химии. – 2014. – Т.50. – Вып.3. – С.357-361.

10. *Синтез и роданирование* N-алкил(трифторметил)сульфонил-1,4-бензохинонмоноиминов / Авдеенко А.П., Коновалова С.А., Михайличенко О.Н. и др. // Журн. орган. химии. – 2011. – Т.47. – Вып.4. – С.513-522.

11. *Авдеенко А.П., Коновалова С.А., Васильева В.М.* Взаимодействие N-фенил-(бензилден-, фенокси-)ацетил-1,4-бензохинонмоноиминов с роданидом калия и азидом натрия // *Вопр. химии и хим. технологии.* – 2012. – № 6. – С.17-22.

12. *Granovsky A.A.*, Firefly version 7.1.G, www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html.

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

Поступила в редакцию 11.09.2014

THIOCYANATION OF N-ARYLAMINOCARBONYL-1,4-BENZOQUINONEMONOIMINES

S.A. Konovalova^a, A.P. Avdeenko^a, A.G. Sergeeva^a, S.A. Goncharova^b, M.V. Polischuk^a

^aDonbass State Engineering Academy, Kramatorsk, Ukraine

^bSumy State University, Sumy, Ukraine

The 1,4-binding of a thiocyanate-ion at the thiocyanation of N-substituted 1,4-benzoquinonmonoimines via a sulfur atom has been earlier suggested to be typical of quinonmonoimines with low LUMO energy, whereas such binding proceeds via a nitrogen atom of thiocyanate for quinonmonoimines with high LUMO energy. The thiocyanation of N-arylamino-carbonyl-1,4-benzoquinonmonoimines leads to the formation of 1,3-benzoxathiol-2-ones and 2-imino-1,3-benzoxathioles which are obtained through the initial 1,4-binding of a thiocyanate-ion via a sulfur atom, 1,3-benzoxathiol-2-ones being the products of hydrolysis of 2-imino-1,3-benzoxathioles. According to the quantum-chemical calculations, the N-arylamino-carbonyl-1,4-benzoquinonmonoimines have lower LUMO energy than N-acetyl- and N-phenylacetyl-1,4-benzoquinonmonoimines, the latter

give the products of binding both via a sulfur atom and via a nitrogen one. This confirms the fact that the LUMO energy of an initial quinonmonoimine is a key factor in the thiocyanation of N-substituted 1,4-benzoquinonmonoimines, the binding of thiocyanate-ions proceeds via a sulfur atom under orbital control.

Keywords: N-arylamino-carbonyl-1,4-benzoquinonmonoimines; potassium thiocyanate; LUMO energy; orbital control.

REFERENCES

1. Loos R., Kobayashi S., Mayr H. Ambident reactivity of the thiocyanate anion revisited: can the product ratio be explained by the hard soft acid base principle. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, vol. 125, no. 46, pp. 14126-14132.

2. Patai S., *The chemistry of cyanates and their thio derivatives.* Part 2, Wiley, Chichester, 1977. pp. 823-828.

3. Avdeenko A.P., Pirozhenko V.V., Konovalova S.A., Roman'kov D.A., Palamarchuk G.V., Shishkin O.V. Thiocyanation of N-arylsulfonyl-, N-aryl-, and N-[(N-arylsulfonyl)benzimidoyl]-1,4-benzoquinone imines. *Rus. J. Org. Chem.*, 2009, vol. 45, no. 3, pp. 408-416.

4. Burmistrov K.S., Toropin N.V., Burmistrov S.I., Nichvoloda V.M. *Vzaimodeystvie N-(p-tolil)-1,4-benzohinonmonoimina s rodanistovodorodnoy kislotoy.* [Interaction of N-(p-tolyl)-1,4-benzoquinonmonoimine with thiocyanic acid]. *Zhurnal Organicheskoi Khimii*, 1992, vol. 28, no. 9, pp. 1900-1904. (in Russian).

5. Konovalova S.A., Avdeenko A.P., Ledeneva O.P., Yusina A.L., Pirozhenko V.V., Shishkin O.V., Palamarchuk G.V. Thiocyanation of N-aryl-, N-acetyl- and N-[(arylsulfonylimino(methyl)methyl) derivatives of 1,4-benzoquinone monoamine. *Rus. J. Org. Chem.*, 2014, vol. 50, no. 5, pp. 635-646.

6. Avdeenko A.P., Konovalova S.A., Sergeeva A.G., Zubatyuk R.I., Palamarchuk G.V., Shishkin O.V. Synthesis and structure of N-alkyl(aryl)aminocarbonyl-1,4-benzoquinone imines. *Rus. J. Org. Chem.*, 2008, vol. 44, no. 12, pp. 1765-1772.

7. Avdeenko A.P., Konovalova S.A., Sergeeva A.G., Palamarchuk G.V., Shishkin O.V. Reaction of N-alkyl(aryl)aminocarbonyl-1,4-benzoquinone monoimines with alcohols. *Rus. J. Org. Chem.*, 2009, vol. 45, no. 5, pp. 674-680.

8. Avdeenko A.P., Konovalova S.A., Sergeeva A.G., Konovalova M.V. *Vzaimodeystvie N-ariaminokarbonil-1,4-benzohinonmonoiminov s arilsulfinatami natriya* [The reaction of 4-arylamino-carbonyl-1,4-benzoquinoneimines with sodium arylsulfates]. *Voprosy khimii i khimicheskoi technologii*, 2010, vol. 2, pp. 9-17. (in Russian).

9. Konovalova S.A., Avdeenko A.P., Sergeeva A.G., Marchenko I.L. Reaction of N-arylcarbonyl-1,4-benzoquinone imines with sodium azide. *Rus. J. Org. Chem.*, 2014, vol. 50, no. 3, pp. 346-350.

10. Avdeenko A.P., Konovalova S.A., Mikhailichenko O.N., Shelyazhenko S.V., Pirozhenko V.V., Yagupol'skii L.M. Synthesis and thiocyanation of N-alkyl(trifluoromethyl)sulfonyl 1,4-benzoquinone monoimines. *Rus. J. Org. Chem.*, 2011, vol. 47, no. 4, pp. 510-519.

11. Avdeenko A.P., Konovalova S.A., Wasiljeva W.M. *Vzaimodeystvie N-fenil(benziliden, fenoksi)atsetil-1,4-benzohinonmonoiminov s rodanidom kaliya i azidom natriya* [Reaction of N-Phenyl(cinnamic, phenoxy)acetyl-1,4-benzoquinonmonoimines with Potassium Thiocyanate and Sodium Azide]. *Voprosy khimii i khimicheskoi technologii*, 2012, vol. 6, pp. 17-22. (in Russian).

12. *Granovsky A.A.*, Firefly version 7.1.G. Available at: http://www.classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html

13. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. General atomic and molecular electronic structure system. *J. Comput. Chem.*, 1993, vol. 14, no. 11, pp. 1347-1363.