**DFT проучавање хемијске реактивности тиобенкарба и његових оксидованих деривата у воденој фази**

ЛУИЗ УМБЕРТО МЕНДОЗА-УЈЗАР[[1]](#footnote-1)\*

*Аутономни Универзитет Државе Хидалго. Академска Област Хемије. Аутопут Пачука-Тулансињо Kм. 4.5 Минерал де ла Реформа, Хидалго, Мексико*

*Извод:* У овом раду, анализиранe су глобална и локална реактивност *S*-4-хлоробензил *N*, *N*-диетилтиокарбамата (TB) и њихових оксидованих деривата (сулфона (TBSu) и сулфоксида (TBS). Проучавана је и хемијска реактивност дехлорованих облика TB (DTB), TBSu (DTBSu) и TBs (DTBs). Израчунавања су изведена на wB97XD/6-311++G(2d,2p) нивоу теорије у воденој фази. Кондезоване функције Fukui-а указују да су у TB и DTB најповољнија места за давање електрона лоцирана на S и N атомима, док су најреактивнија места за прихватање електрона придружена ароматичном прстену (AR). За TBS и DTBS, најреактивнија места су лоцирана на AR, S и AR за нуклеофилне, електрофилне односно слободнорадикалске нападе. У случају TBSu и DTBSu, AR испада да је најреактивнија зона за све три врсте напада. Последњи резултати сугеришу да је раскидање C–S везе у TB, TBS и њиховим дехлорованим облицима фаворизовано електрофилним нападима. Поред тога, наши резултати сугеришу да је у TB вероватно раскидање C-N фаворизовано нападањем електрофилима на овај молекул.

*Кључне речи:* тиобенкарб; Fukui-ева функција; двојни дескриптор; DFT.

1. \*Corresponding author. E-mail: hhuizar@uaeh.edu.mx [↑](#footnote-ref-1)