

Тематическое направление: Винилзамещенные карбен(оид)ы. Часть I.

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЕЙ И СОЛЕЙ МЕТАЛЛОВ НА ПРЕВРАЩЕНИЯ ЦИКЛОПРОПЕНОВ.

© Mark S. Baird,^{1*} Курдюков Александр Иванович^{2*+} и Шамов Григорий Александрович³

¹ Department of Chemistry, University of Wales, Bangor, Gwynedd LL57 2UW, U.K.

Fax: +44 (0-1248) 370-528. E-mail: chs028@bangor.ac.uk

² Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. Тел: (8432) 194-230. E-mail: akourdi@kstu.ru

³ Кафедра органической химии. Казанский государственный университет. Ул. Кремлевская, 18.

г. Казань 420008. Россия. E-mail: grigori.shamov@ksu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: циклопропены, винилкарбены, литий галогениды, цинк дихлорид, винилкарбеноиды, гем-галогенлитийкарбеноиды.

Резюме

Квантово-химически (MNDO, PM3 методы) промоделированы потенциальные реакционные пути сольватно-термолитических и металл-*assisted* превращений винилкарбено(идо)в и их предшественников. Подтверждено, что литий и цинк галогениды, в зависимости от структурных особенностей циклопропенов, могут являться катализаторами или реагентами в циклопропен-винилкарбеновых и последующих винилкарбеноидных превращениях.