

Индексы реакционной способности алкенов в реакции аминотилирования

© Талипов Рифкат Фаатович, Вакулин* Иван Валентинович,
Галияхметов Азамат Раильевич, Латыпова⁺ Эльвира Разифовна
и Талипова Гузалия Рафаиловна

*Кафедра органической и биоорганической химии. Башкирский государственный университет.
Ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (347) 229-97-29. E-mail: levirar@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аминотилирование алкенов, аминотильный карбокатион, реакция Манниха, теория функционала плотности, NBO-анализ, индексы реакционной способности.

Аннотация

Квантово-химическими методами рассмотрены особенности взаимодействия алкенов с аминотильными карбокатионами. Расчеты в приближении B3LYP/6-31G(d,p) и последующий NBO анализ показывают, что корректный индекс реакционной способности может быть получен на основе значений вкладов атомных орбиталей Csp^2 в образование кратной связи. Он хорошо согласуется с литературными данными по реакционной способности алкенов в реакции электрофильного присоединения аминотильных карбокатионов по кратной связи.