

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**  
Подраздел: Физическая органическая химия. Регистрационный код публикации: 6-8-1-1

**Примечание:** Биографические сведения авторов смотри в *Бутлеровских сообщениях*. 2002. Т.2. №6. 31. (код pho5)  
Предыдущее сообщение этой серии смотри в *Бутлеровских сообщениях*. 2005. Т.7. №4. 1. (код 5-7-4-1)

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>  
Поступила в редакцию 21 января 2005 г. УДК 547.68+541.124/128.

Тематическое направление: Влияние среды на реакционную способность. Часть XI.

## **Численная характеристика положения переходного состояния реакции циклоприсоединения в растворе как функция свойств растворителя.**

© **Урядов Владимир Георгиевич**<sup>1+</sup> и **Офицеров Евгений Николаевич**<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> *Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.  
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.*

*Тел.: (8432) 721-253. E-mail: uryadov@kstu.ru*

<sup>2</sup> *Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия.*

*Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru*

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** реакции циклоприсоединения, критические параметры, энтальпия испарения.

### **Аннотация**

Рассмотрена взаимосвязь величины «х», рассматриваемой в качестве относительной численной характеристики положения переходного состояния на координате реакции циклоприсоединения в растворе, с критическими параметрами растворителя и параметрами, характеризующими изменение структуры молекул при переходе от реагентов к продуктам. Показано, что усредненные значения величины «х», рассчитанные с использованием параметров растворителей – соответствуют значениям величины «х», рассчитанным с использованием экспериментальных данных по кинетики и термодинамике реакции циклоприсоединения.