

## Дискуссионная рубрика

Регистрационный код публикации: 9-15-2-66

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.

Подраздел: Физическая органическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 547.68+541.124/128. Поступила в редакцию 16 августа 2009 г.

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

# Расчеты энтропии активации и теплового эффекта реакции циклоприсоединения в растворе

© Урядов Владимир Георгиевич

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](mailto:uryadov@kstu.ru)

\*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** энтропия активации, тепловой эффект реакции, теоретический расчет.

## Аннотация

Методом, принципиально отличающимся от квантовых, выполнен расчет значений энтропии активации и теплового эффекта 20-ти реакций циклоприсоединения в растворе. Рассматриваемые объекты составили: некатализируемые реакции диенового синтеза, реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения и реакции полярного [2+2]-циклоприсоединения. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными. Сопоставление свидетельствует в пользу близости расчетных значений и данных эксперимента.