

## Полная исследовательская публикация

Тематический раздел: Квантовая химия.

Регистрационный код публикации: 12-30-6-26

Подраздел: Органическая химия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 544.122.4: 544.163.2: 544.18: 544.43. Поступила в редакцию 27 июня 2012 г.

Тематическое направление: Теоретическое исследование механизма изомеризации ароматических нитрозооксидов. Часть I.

## Влияние ориентации заместителя на активационный барьер орто-циклизации

© Панкратьев Евгений Юрьевич<sup>+</sup> и Сафиуллин Рустам Лутфуллович\*

Лаборатория химической кинетики. Институт органической химии Уфимского научного центра РАН. Просп. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия.  
Тел.: (347) 292-14-19. Факс: (347) 235-60-66. E-mail: [evgeniy@pankratyev.com](mailto:evgeniy@pankratyev.com)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** нитрозооксиды, изомеризация, орто-циклизация, *ab initio* и DFT-расчёты.

### Аннотация

В квантово-химических приближениях G3MP2B3, UB3LYP/6-311+G(d,p), UPBEPBE/Λ2 и UPBEPBE/3ζ изучено влияние ориентации заместителя (на примере CH<sub>3</sub>-O-, CH<sub>3</sub>-S-, CH<sub>2</sub>=CH-, CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-) ароматического цикла фенил-цис-нитрозооксида на активационные барьеры реакции орто-циклизации. Предложена методика расчёта эффективных активационных параметров для учёта влияния конформационных превращений на активационные барьеры орто-циклизации замещённых фенил-цис-нитрозооксидов. Уточнен активационный барьер орто-циклизации пара-метоксифенил-цис-нитрозооксида, в приближении UB3LYP/6-311+G(d,p) составляющий 70.4 кДж/моль.