

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROl: jbc-01/15-41-2-90 Подраздел: Органическая химия.
Статья публикуется как материал заочного участия в Международном научном
форуме “Бутлеровское наследие-2015”. <http://foundation.butlerov.com/bh-2015/>
УДК 544.18+547.793+544.174. Поступила в редакцию 17 марта 2015 г.

Новый взгляд на перегруппировку Боултона-Катрицкого

© Рыбин⁺ Тимофей Владимирович и Белик^{*+} Александр Васильевич

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский Государственный
Университет. Ул. Братьев Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Челябинская Область. Россия.
Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: rybintv@csu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетероциклы, фуроксаны, перегруппировка Боултона-Катрицкого, расчёты DFT.

Аннотация

В работе произведён анализ поведения зарядов атомов в ходе молекулярных колебаний в соединениях, участвующих в перегруппировке Боултона-Катрицкого. Установлена зависимость между направлением перегруппировки и поведением зарядов определённых атомов в исходных и конечных соединениях в ходе колебаний. Предложено использовать данный метод для определения направления протекания перегруппировки.