

Теоретическое изучение циклизации спиральных соединений $C_nN_nO_nH_n$ ($n = 4, 5, 6$)

© Гарифзянова Гюзель Габдульбаровна

Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.
Казанский национальный исследовательский технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: +7 (843) 231-42-53. E-mail: garifz@kstu.ru

Ключевые слова: квантово-химический расчет, шестичленный цикл, фульминовая кислота, метод QM_N3.

Аннотация

Кислоты, состоящие из четырех различных атомов – водорода, углерода, кислорода и азота известны давно. Наиболее стабильными являются циановая и изоциановая кислоты, фульминовая кислота и изофульминовой кислоты. Эти четыре кислоты являются изомерами и обладают плоскими равновесными структурами. Проведены квантово-химических расчеты циклизации в газовой фазе в программе *Priroda* соединений общей формулой $C_nN_nO_nH_n$ ($n = 4, 5, 6$). Исходные соединения имеют спиральное строение и состоят из $n-1$ молекул фульминовой кислоты и одной молекулой оксазирина на конце. Данные соединения могут переходить в циклические соединения. Были рассчитаны переходные состояния для циклизации в тример фульминовой кислоты. Для $n = 4$ энтальпия активации образования шестичленного цикла – тримера фульминовой кислоты составляет 5.11 ккал/моль. Найдено, что для соединения с $n = 5$ образуется бициклический продукт с энергетическим барьером 21.36 ккал/моль, для $n = 6$ происходит отрыв кольца из трех молекул фульминовой кислоты с энергетическим барьером 21.60 ккал/моль.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Гарифзянова Г.Г. Теоретическое изучение циклизации спиральных соединений $C_nN_nO_nH_n$ ($n = 4, 5, 6$). *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №11. С.153-156. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-153

или

Guzel G. Garifzianova. Theoretical study of the cyclization of helical compounds $C_nN_nO_nH_n$ ($n = 4, 5, 6$). *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.11. P.153-156. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-11-153. (Russian)