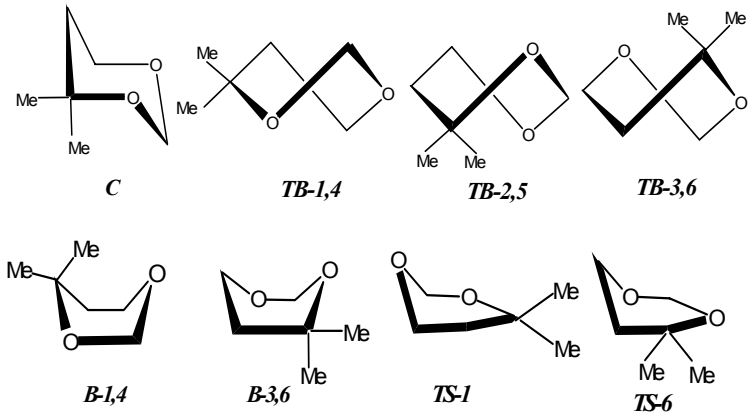
ПЕРЕХОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ ИНВЕРСИИ ЦИКЛА 4,4-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА

Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Кантор Е.А.
Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа

Шорников Д.В.
Горбунова Н.В.
Кантор Е.А.
УГНТУ

Методом, основанным на теории функционала плотности (DFT) B3PW91 в валентно-расщепленном базисе 6-31G(d,p), был проведен квантово-химический анализ поверхности потенциальной энергии 4,4-диметил-1,3-диоксана. Зафиксированы восемь стационарных точек, четыре из которых соответствуют минимумам потенциальной энергии и четыре – переходным состояниям (ПС).



При инверсии C↔TB-1,4 зафиксировано ПС TS-1; C↔TB-2,5 и C↔TB-3,6 – TS-6. Взаимные превращения твистовых форм осуществляются через ПС B-1,4 (TB-1,4↔TB-2,5 и TB-1,4↔TB-3,6) и B-3,6 (TB-2,5↔TB-3,6).

Торсионные углы молекулы 4,4-диметил-1,3-диоксана в стационарных точках на ППЭ

Конформация		Торсионные углы, град. (нумерация атомов по IUPAC)					
КЛ [1]*	**ЗП [2]***	**1-2**	**2-3**	**3-4**	**4-5**	**5-6**	**6-1**
C	C	-62	59	-50	47	-53	58
TB-1,4	between twist and envelope	-69	41	19	-55	30	28
TB-2,5	TB	35	-70	32	27	-60	28
TB-3,6	TB	31	36	-62	22	39	-70
B-1,4	B	-57	2	48	-45	-4	56
B-3,6	B	-5	-53	50	5	-57	58
TS-1	HC	-74	55	-12	-11	-7	47
TS-6	between screw-boat and envelope	45	-1	-13	-14	55	-73

*Определение конформации проводилось по методу Купче-Лукевица [КЛ] и Зефирова-Палюлина [ЗП].

Литература

1. *Купче Э.Л., Лукевиц Э.* Конформационные карты средних циклов.// ХГС. – 1988. – № 4. – С. 542.
2. *Zotov A.Yu., Palyulin V.A., Zefirov N.S.* RICON – the computer program for the quantitative investigations of cyclic organic molecule conformations.//J.Chem.Inf.Comput.Sci.1997,37,p.766