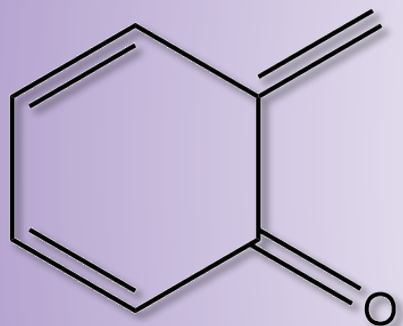


**Расчет энергетического
профиля реакции
N,N,N',N'-
тетраметилгуанидина с
o-метиленихиноном**

**Изучение механизма реакции –
важное звено при анализе
химических превращений**

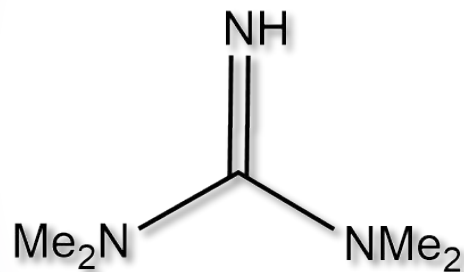
**Методы квантовой механики
позволяют
предположить механизм реакции
на основании расчетов**

СХЕМА РЕАКЦИ И

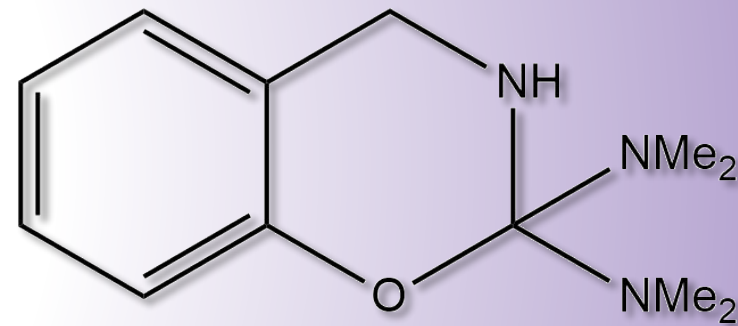


o-метиленихинон
(o-MX)

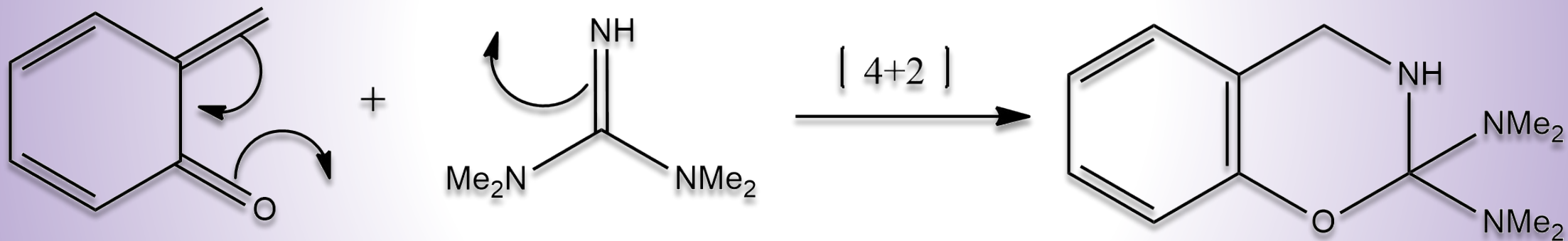
+



N,N,N',N'-
тетраметилгуанидин
(ТМГ)

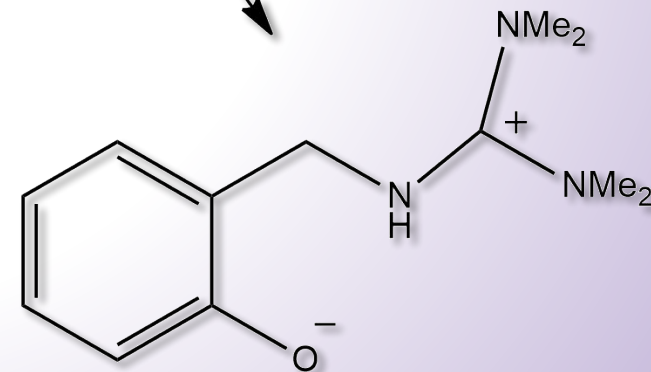
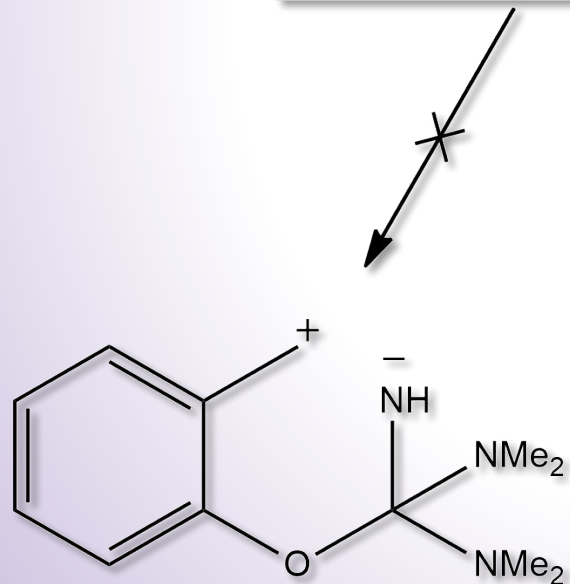
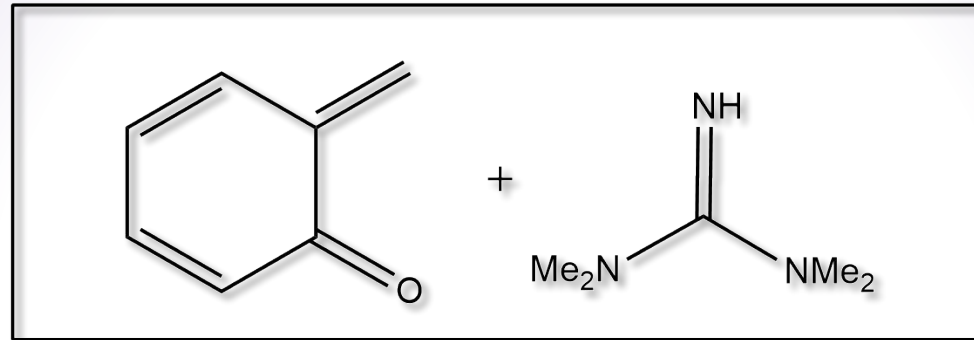


Предполагаемый механизм реакции



**Согласованное, асинхронное [4+2]-
циклоприсоединение**

Направление реакции



Процесс поиска переходного состояния



ТМГ + *o*-
МХ

- Не удалось найти ПС

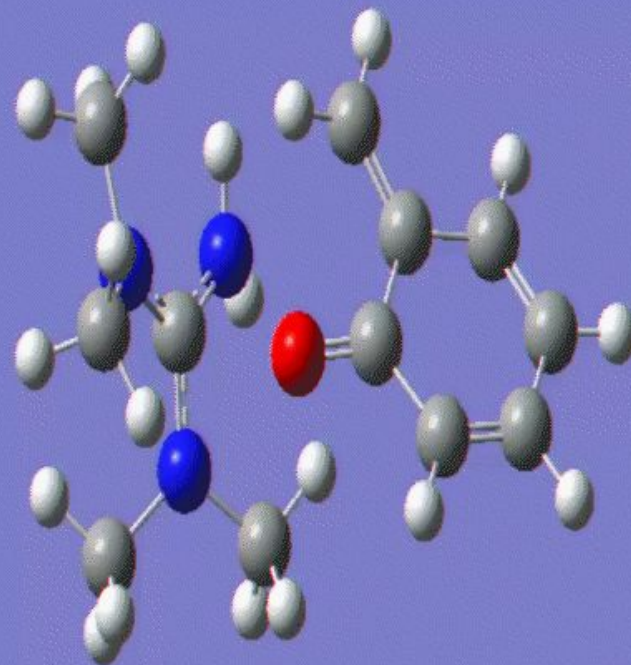
ТМГ + Н⁺

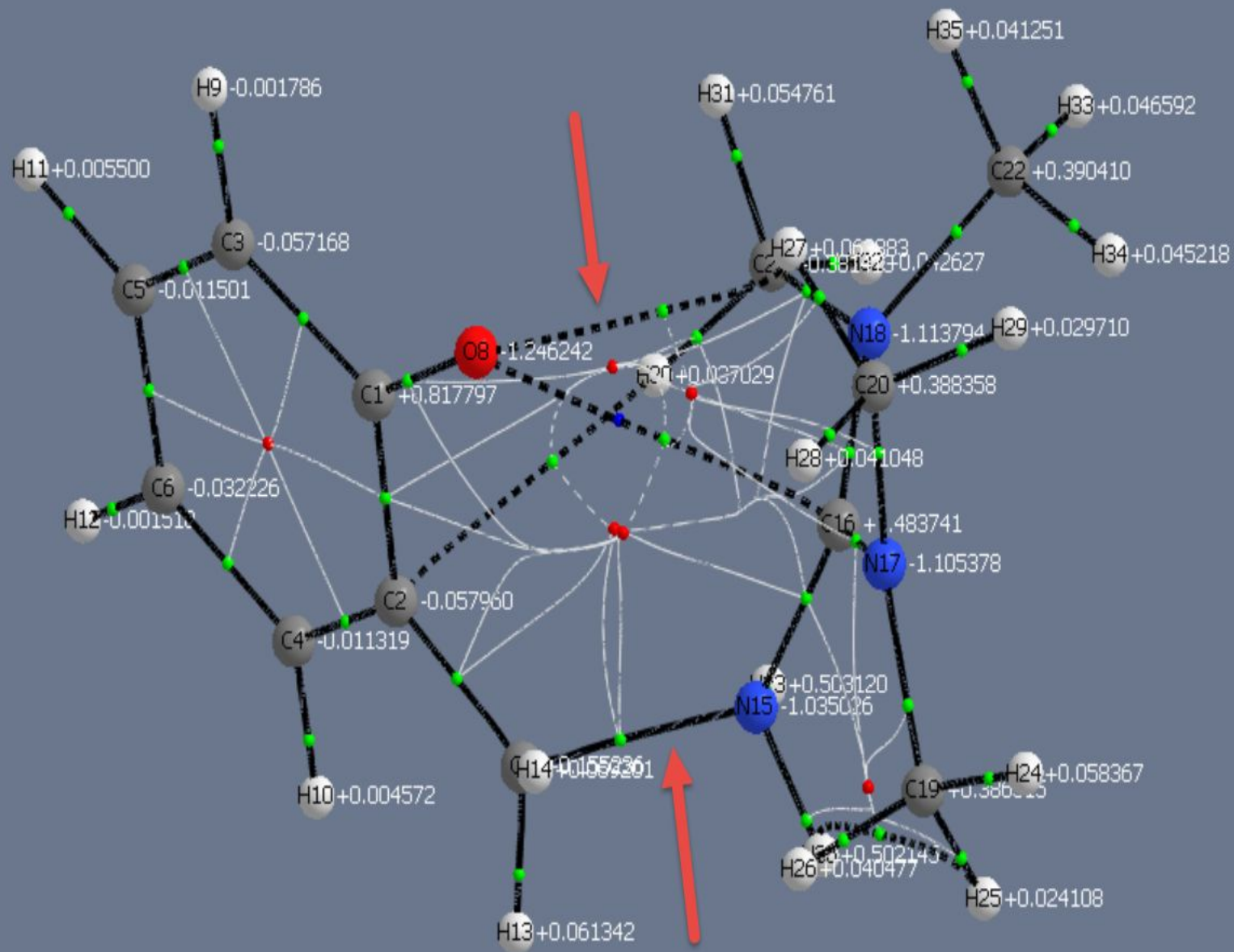
- Произвели протонирование ТМГ
- Повторили поиск ПС

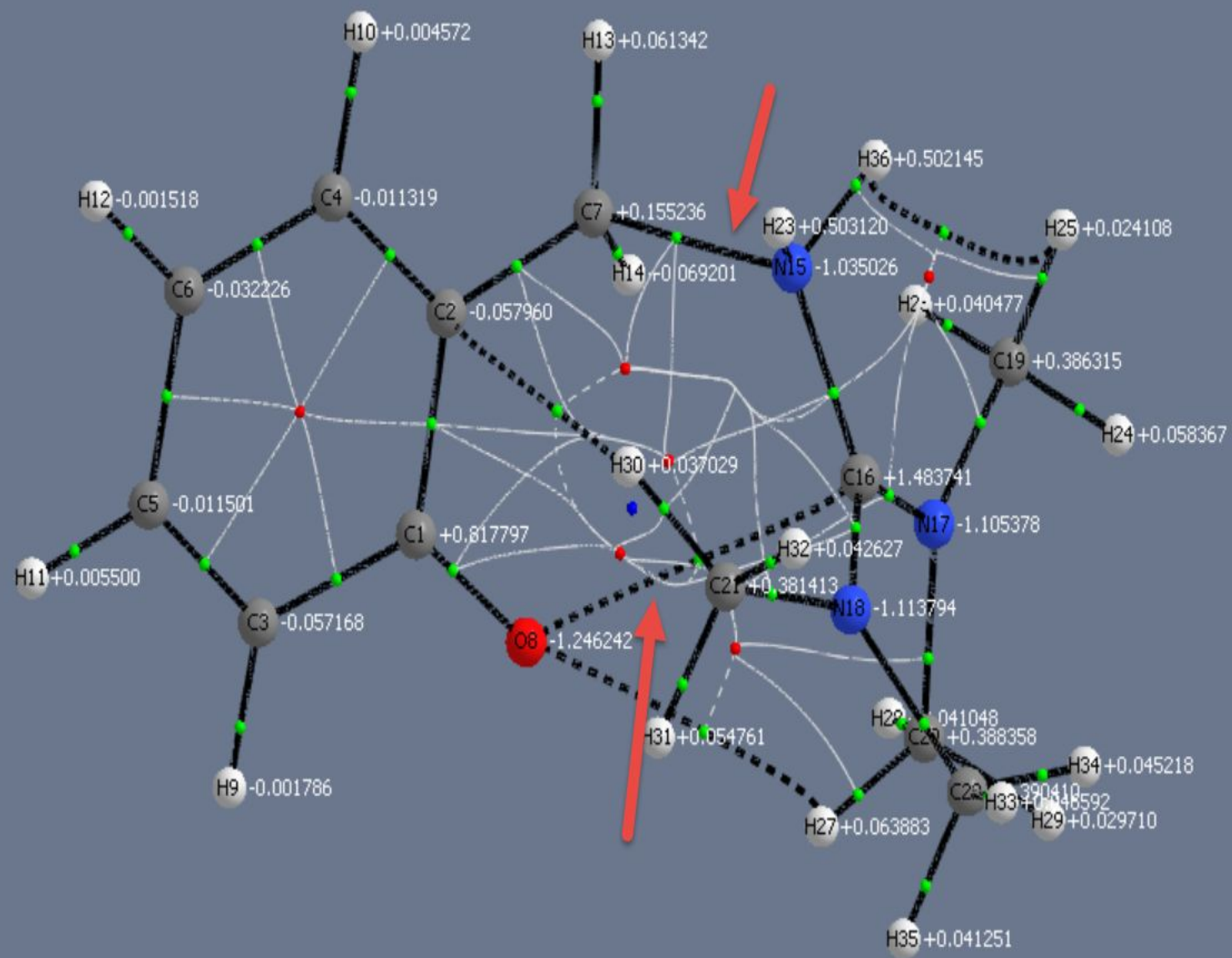
ТМГН⁺ +
o-МХ

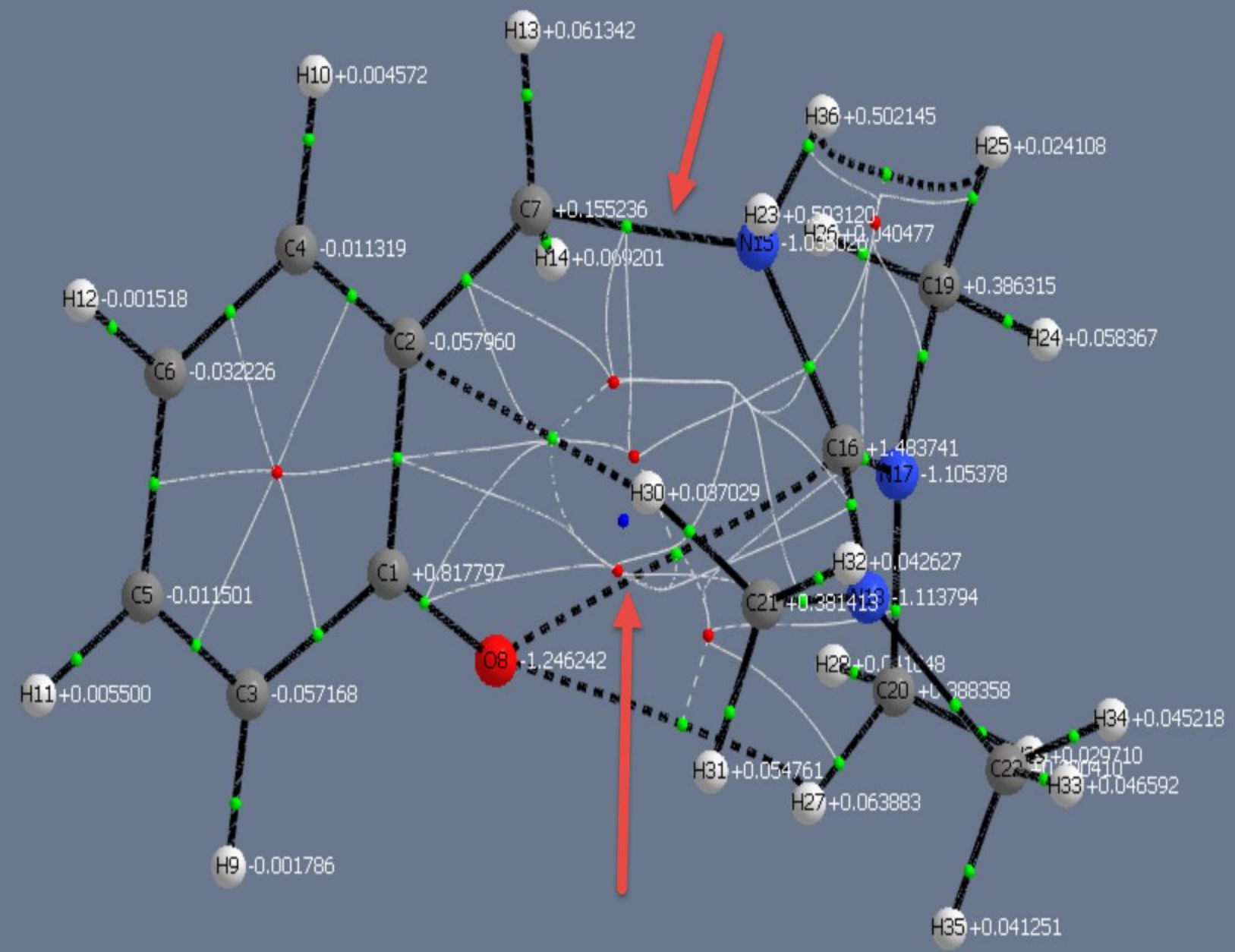
- ПС было успешно найдено

Внутренний путь реакции

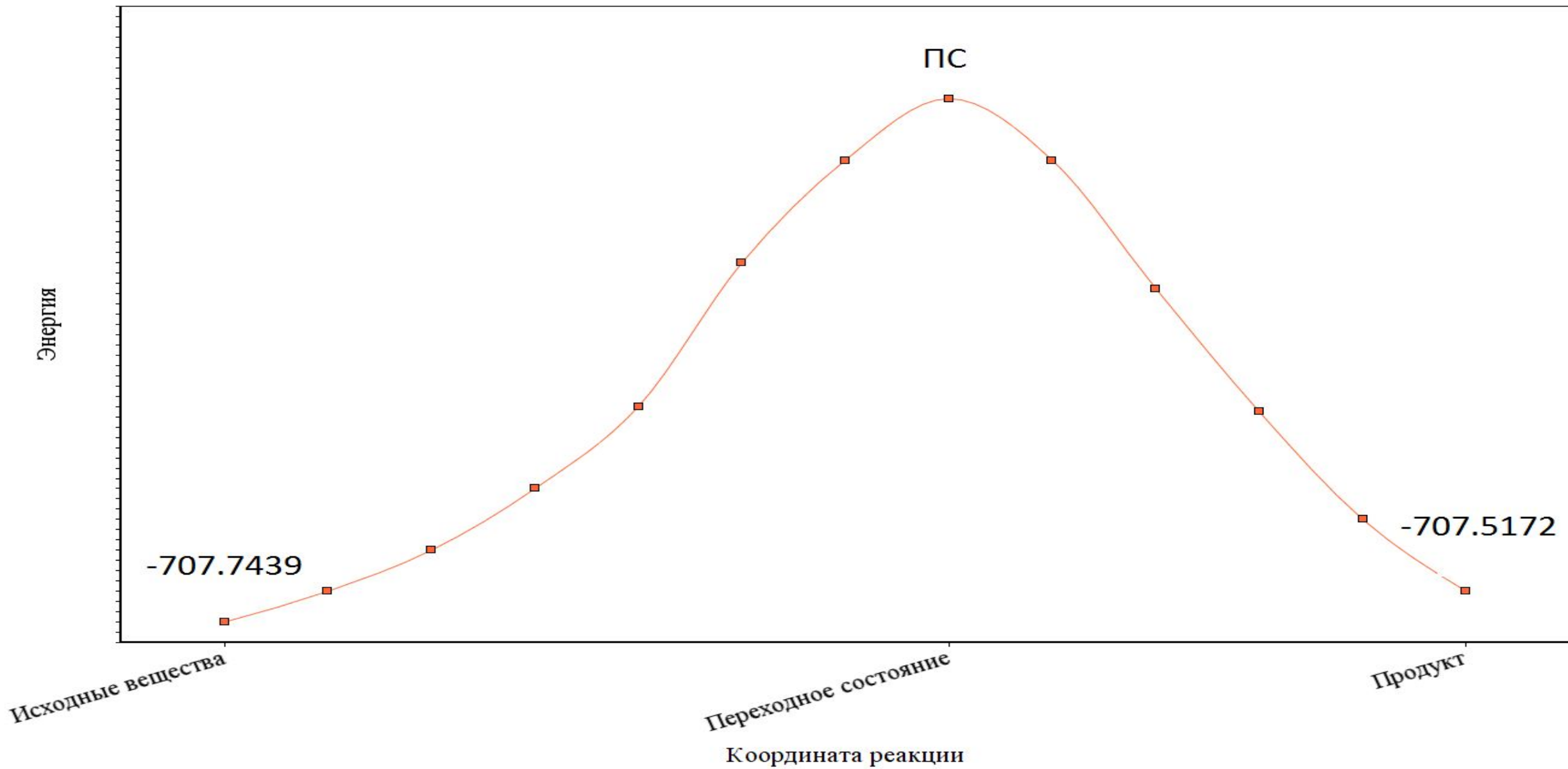








Энергетический профиль реакции



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ!**