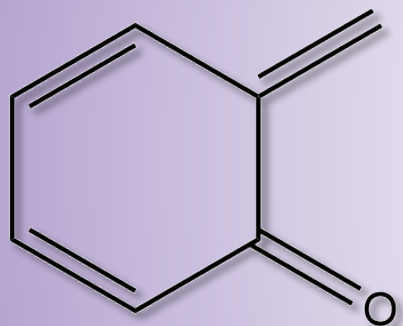


**Расчет энергетического  
профиля реакции  
N,N,N',N'-  
тетраметилгуанидина с  
o-метиленихиноном**

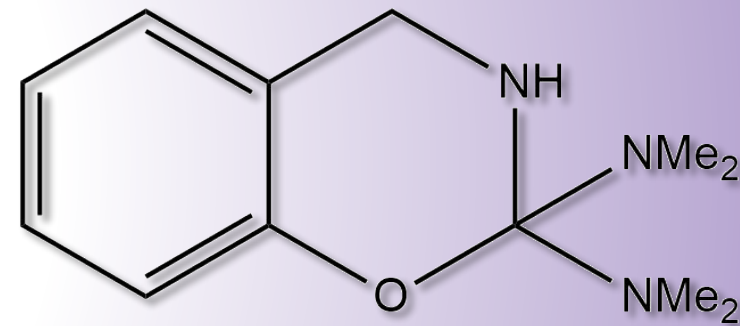
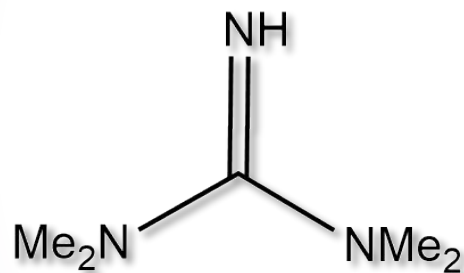
**Изучение механизма реакции –  
важное звено при анализе  
химических превращений**

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

СХЕМА  
РЕАКЦИ  
И



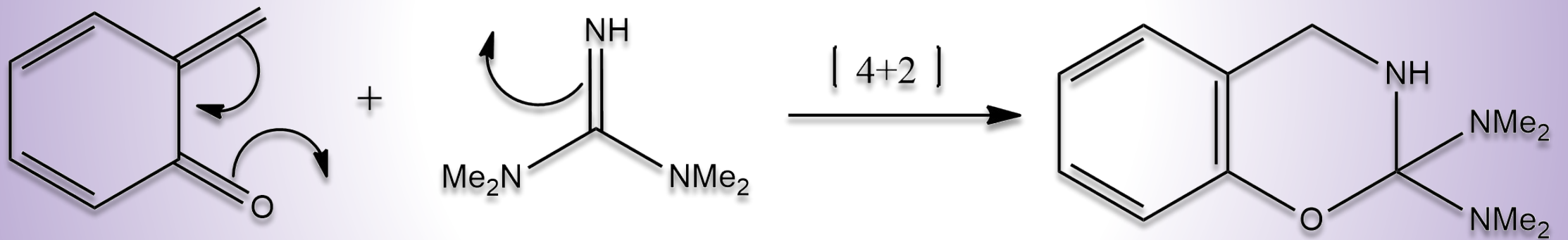
+



o-метиленихинон  
(o-MX)

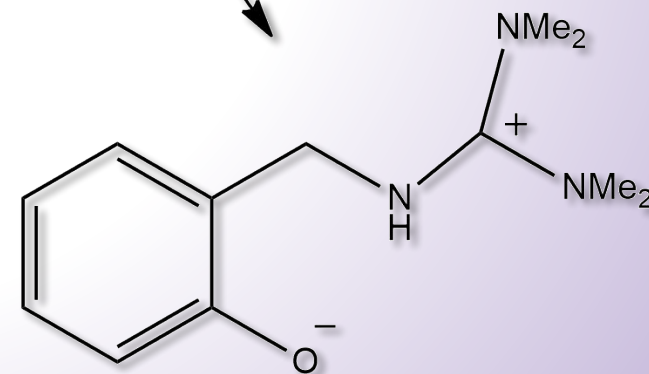
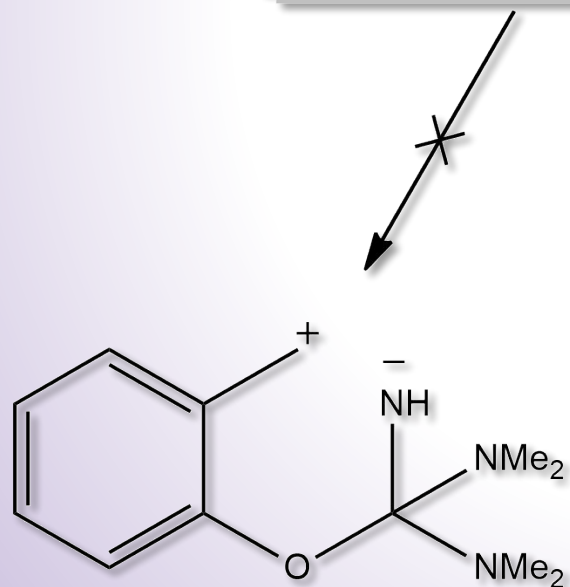
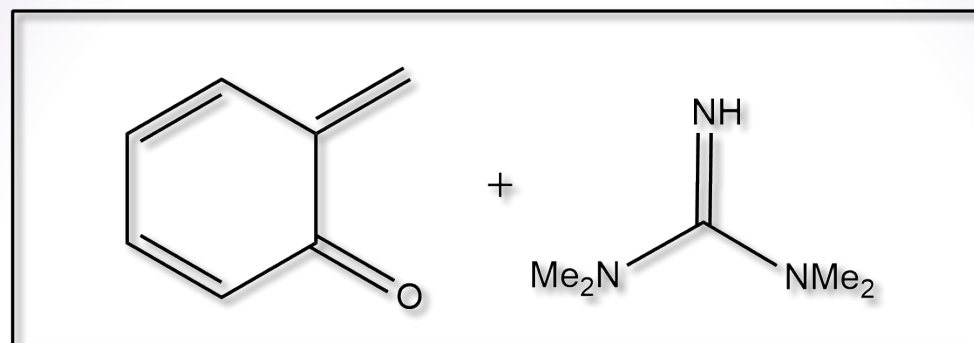
N,N,N',N'-  
тетраметилгуанидин  
(ТМГ)

# Предполагаемый механизм реакции



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

# Направление реакции



# Процесс поиска переходного состояния



ТМГ + *o*-  
МХ

- Не удалось найти ПС

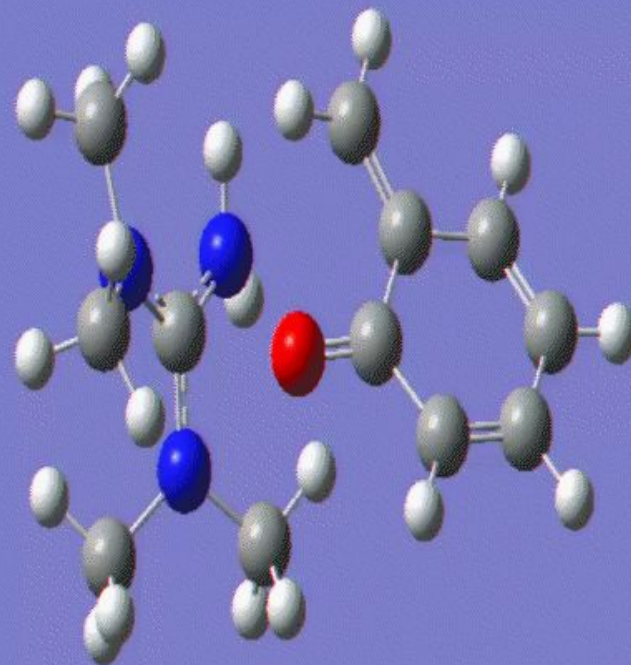
ТМГ + Н<sup>+</sup>

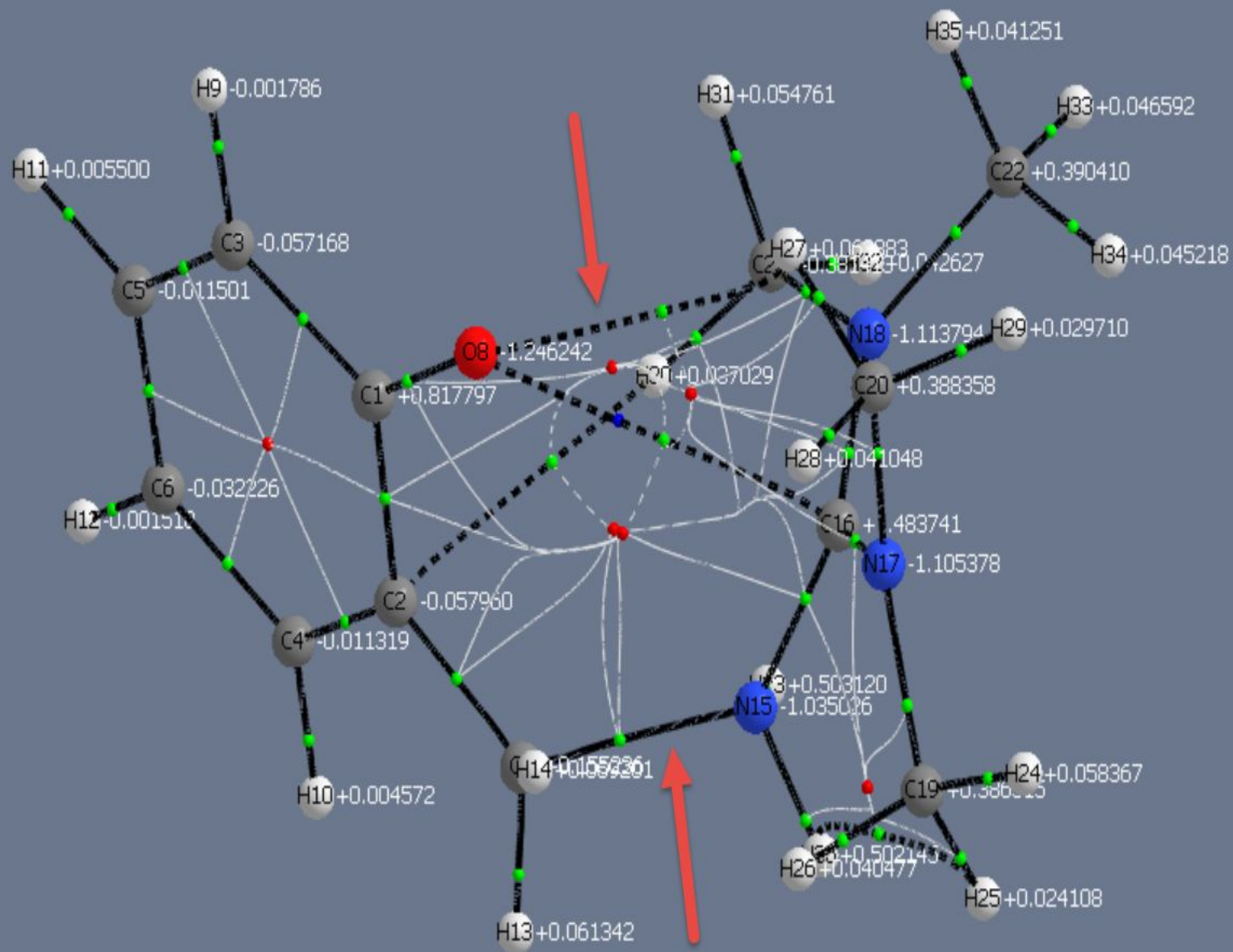
- Произвели протонирование ТМГ
- Повторили поиск ПС

ТМГН<sup>+</sup> +  
*o*-МХ

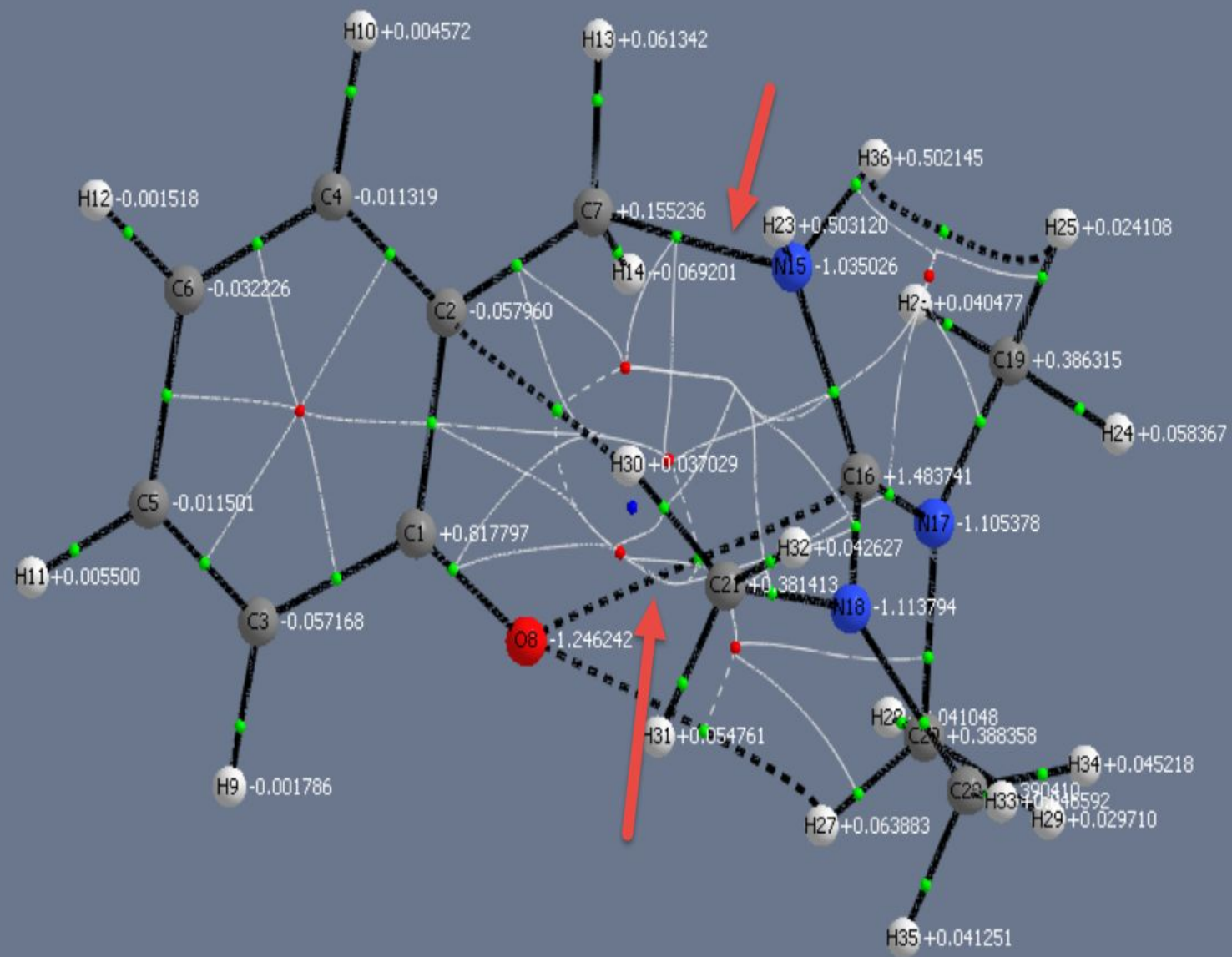
- ПС было успешно найдено

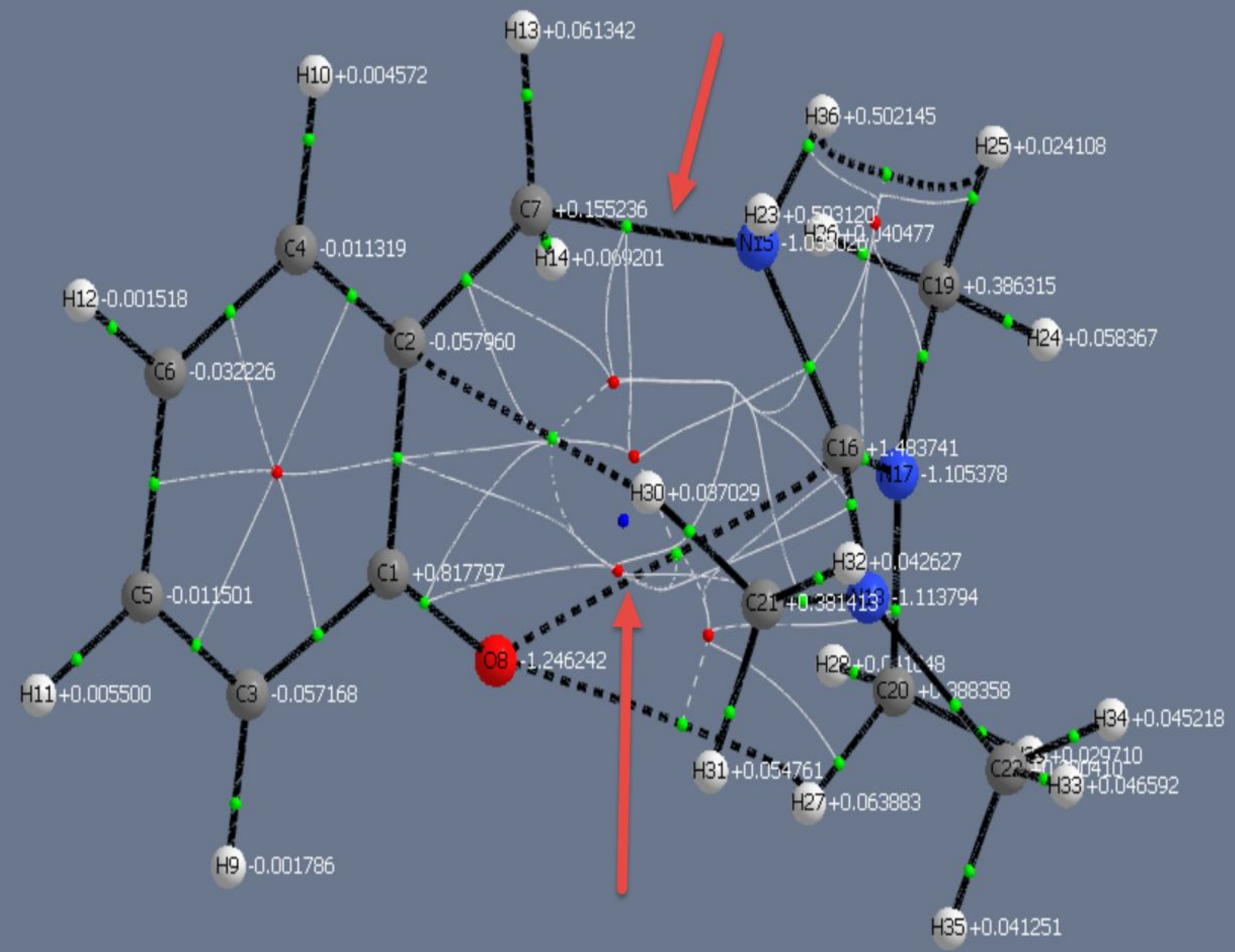
# Внутренний путь реакции



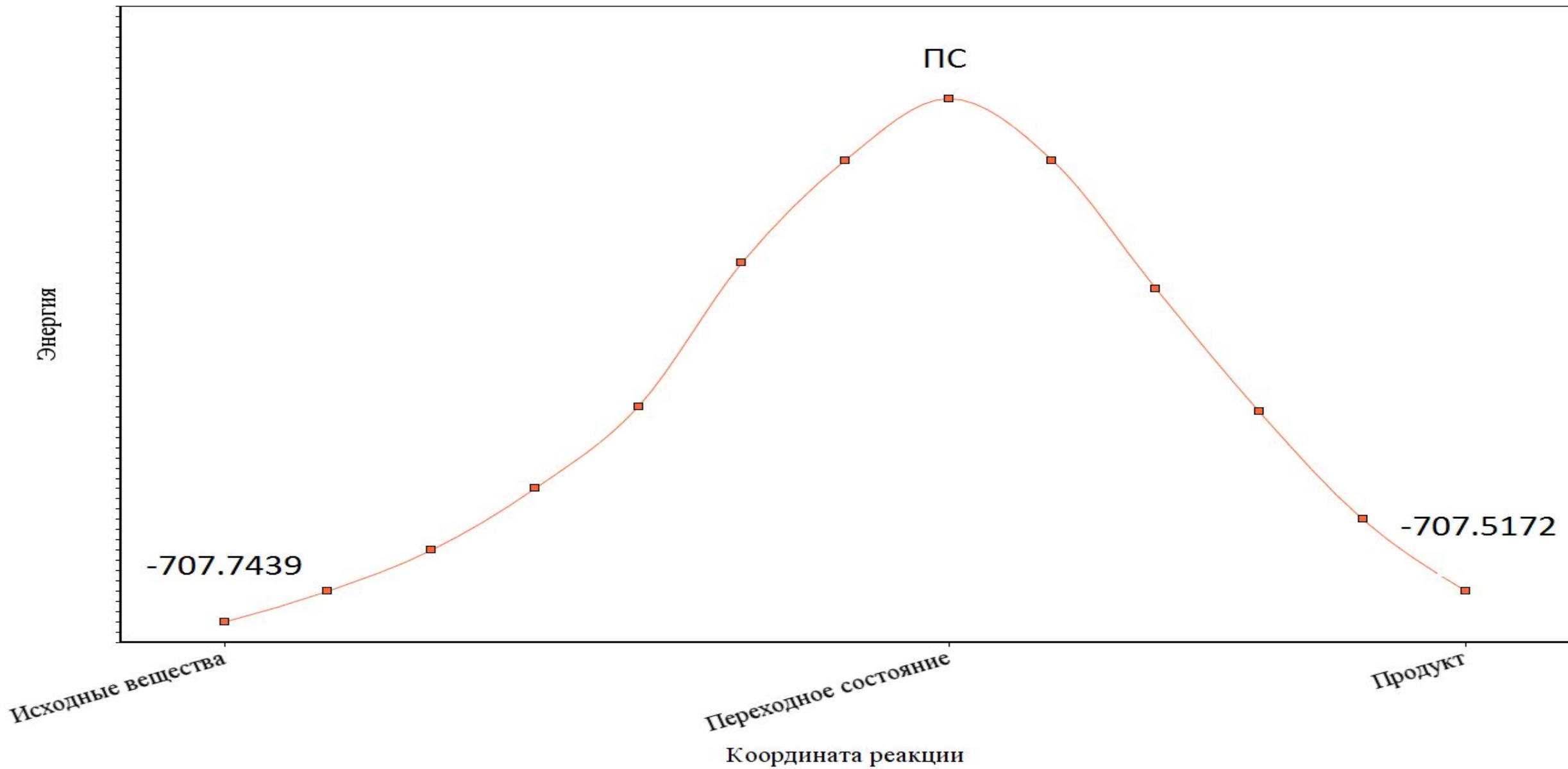








# Энергетический профиль реакции



**СПАСИБО ЗА  
ВНИМАНИЕ!**