

Тематическое направление: Квантово-химические расчеты переходных состояний реакций элиминирования, присоединения и замещения. Часть I.

## AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЯ E2 И S<sub>N</sub>2 РЕАКЦИЙ ФТОР-АНИОНА С ХЛОРЦИКЛОАЛКАНАМИ.

© Апполонова Светлана Александровна,<sup>1</sup> Ермолаева Людмила Владимировна,<sup>1</sup>  
Племенков Виталий Владимирович<sup>2\*</sup> и Коновалов Александр Иванович<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КНЦ РАН. Ул. Арбузова, 8. г. Казань 420088. Россия.  
E-mail: appolo@alc.tatarstan.ru

<sup>2</sup> Кафедра общей и органической химии. Казанский государственный медицинский университет им. С.В. Курашова.  
Ул. Бутлерова, 49. г. Казань 420012. Россия. Тел.: (8432) 389-744. Факс: (8432) 360-393

\*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** E2 элиминирование, S<sub>N</sub>2 замещение, механизм, хлорциклоалканы, переходное состояние, ион-дипольные комплексы.

### Резюме

Используя квантово-химический расчет методом *ab initio* (6-31(+)\*G\*/HF/6-31(+)\*G\*) изучены E2 и S<sub>N</sub>2 реакции на примере взаимодействия F<sup>-</sup> с хлорциклопропаном и хлорциклобутаном. Были локализованы переходные состояния E2(*анти*), E2(*син*) и S<sub>N</sub>2 процессов. Найдено, что в хлорциклопропане барьер *син*-элиминирования всего лишь на 3.5 ккал·моль<sup>-1</sup> выше барьера *анти*-элиминирования, тогда как для хлорциклобутана эта разница составляет 8.09 ккал·моль<sup>-1</sup>. Эти величины существенно меньше, чем в случае хлорциклопентана (ΔE<sub>анти-син</sub>=13.8 ккал·моль<sup>-1</sup>) и хлорциклогексана (18.7 ккал·моль<sup>-1</sup>). Таким образом, при уменьшении размера цикла энергетическая разница между E2(*анти*)- и E2(*син*)-путями значительно уменьшается. В то же время, энергетическая разница между S<sub>N</sub>2 и E2(*анти*) процессами в этом ряду соединений меняется в обратном порядке.