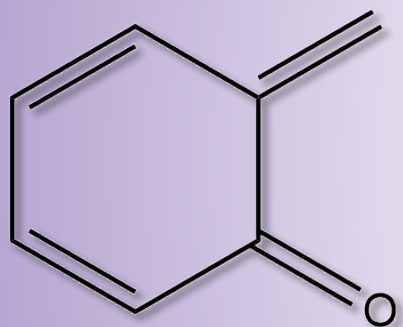


**Расчет энергетического
профиля реакции
N,N,N',N'-
тетраметилгуанидина с
о-метилбенхиноном**

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

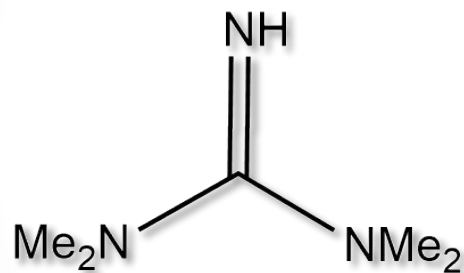
**Методы квантовой механики
позволяют
предположить механизм реакции
на основании расчетов**

СХЕМА РЕАКЦИ И

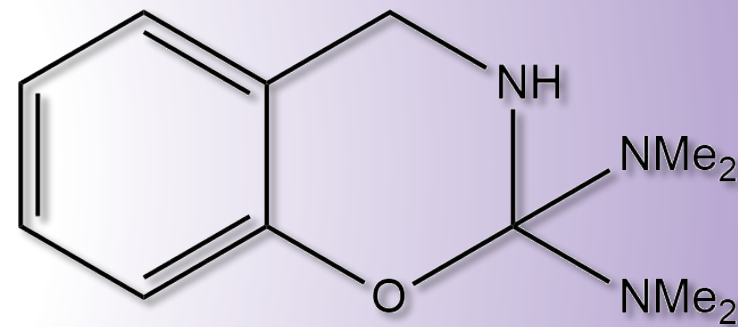


о-метиленихинон
(о-MX)

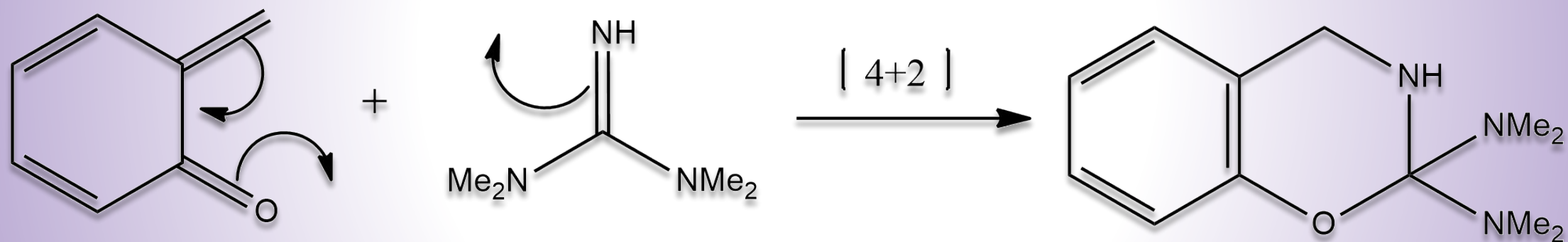
+



N,N,N',N'-
тетраметилгуанидин
(ТМГ)

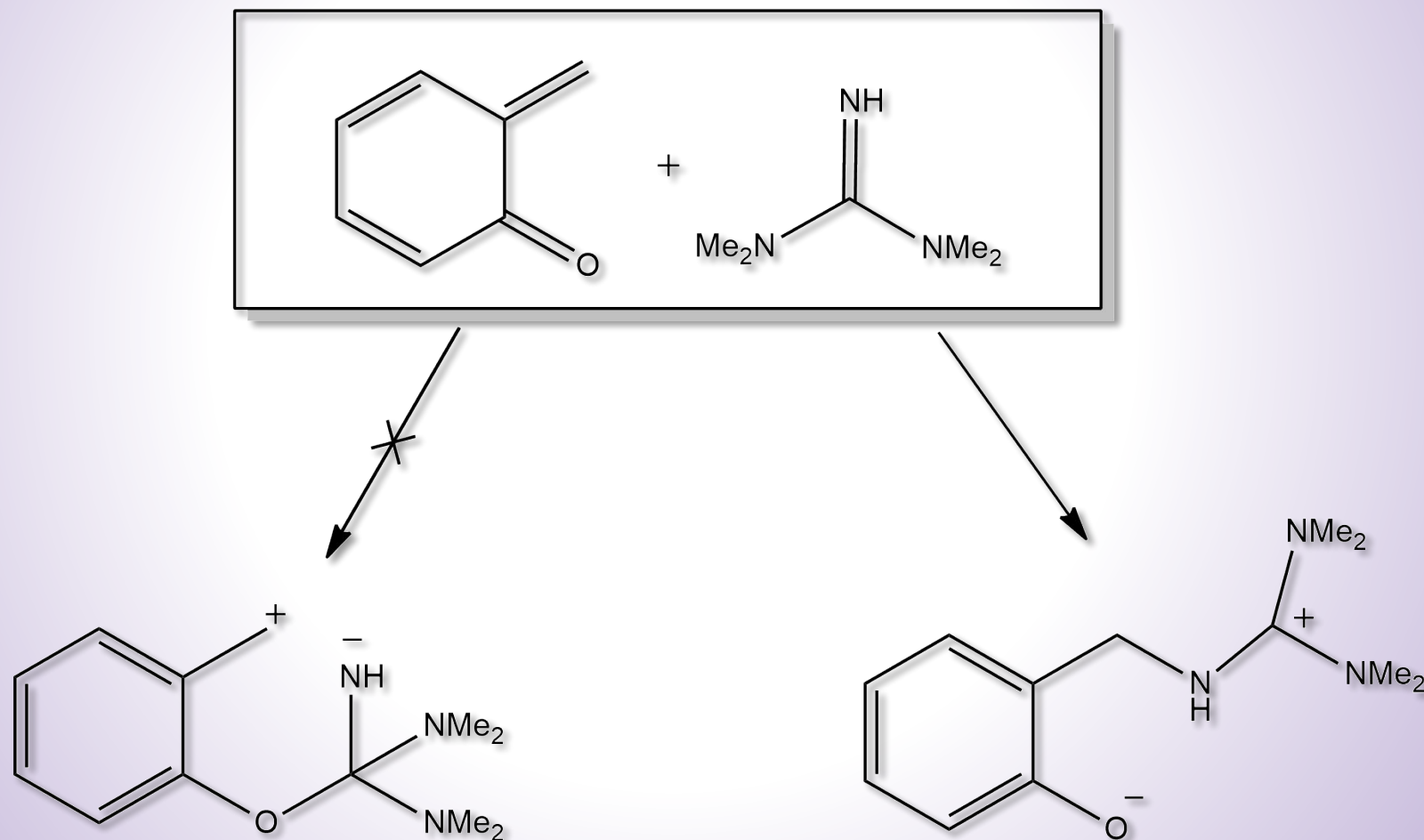


Предполагаемый механизм реакции



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

Направление реакции



Процесс поиска переходного состояния



ТМГ + *o*-MX

- Не удалось найти ПС

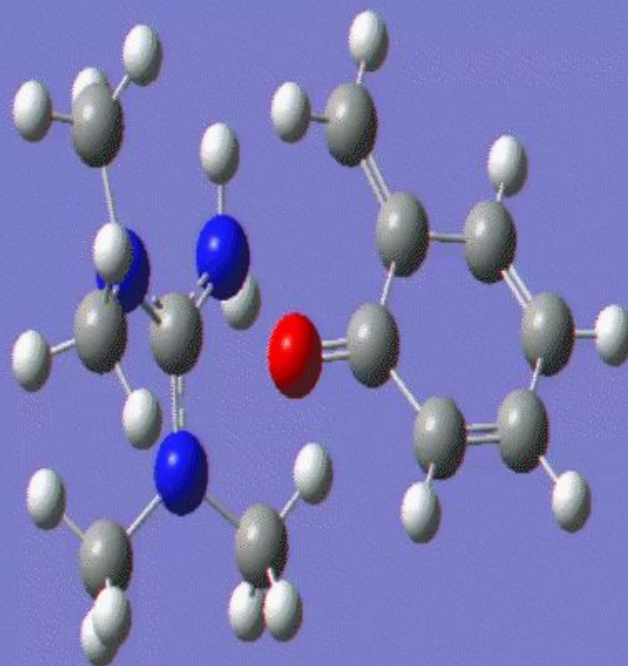
ТМГ + H⁺

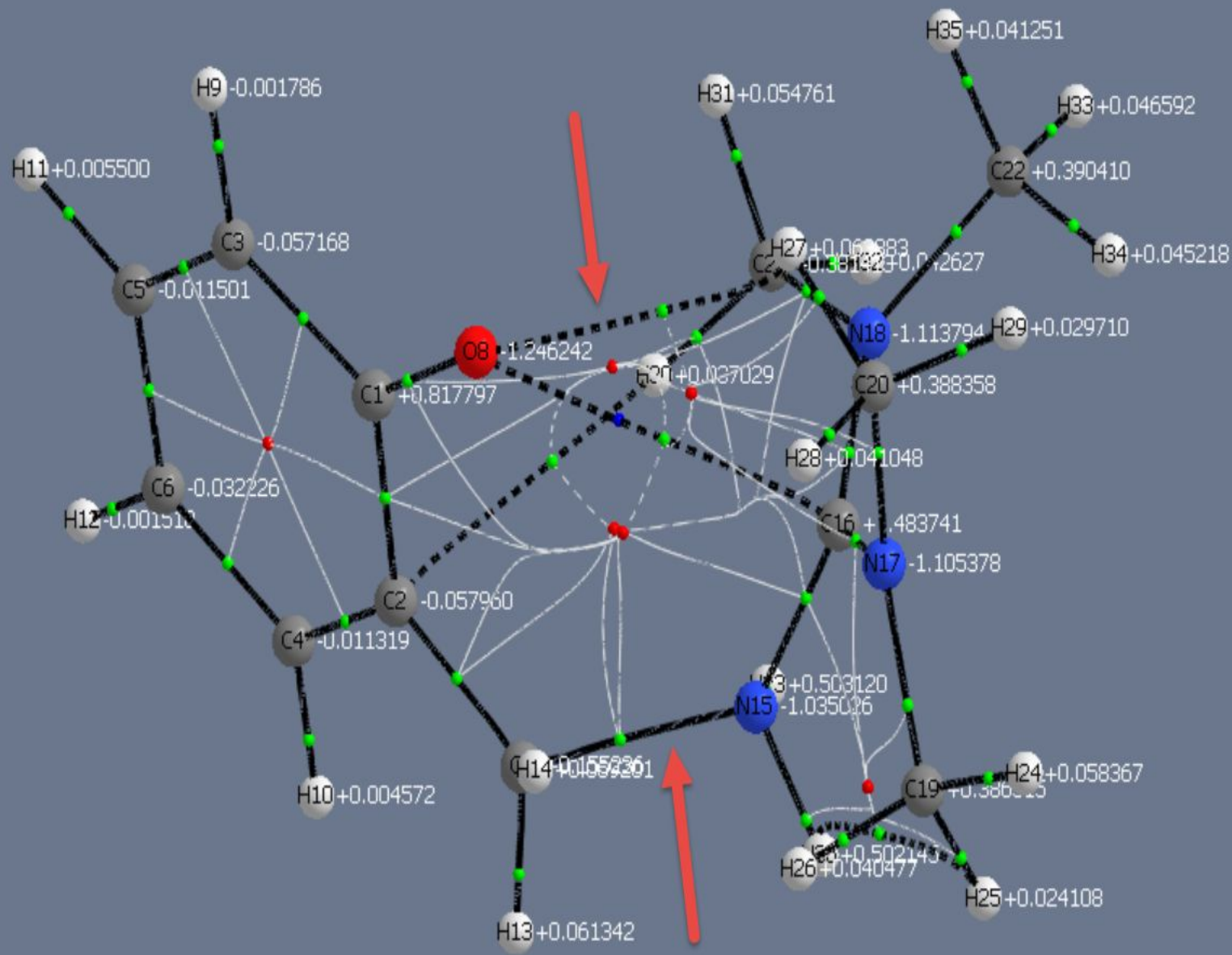
- Произвели протонирование ТМГ
- Повторили поиск ПС

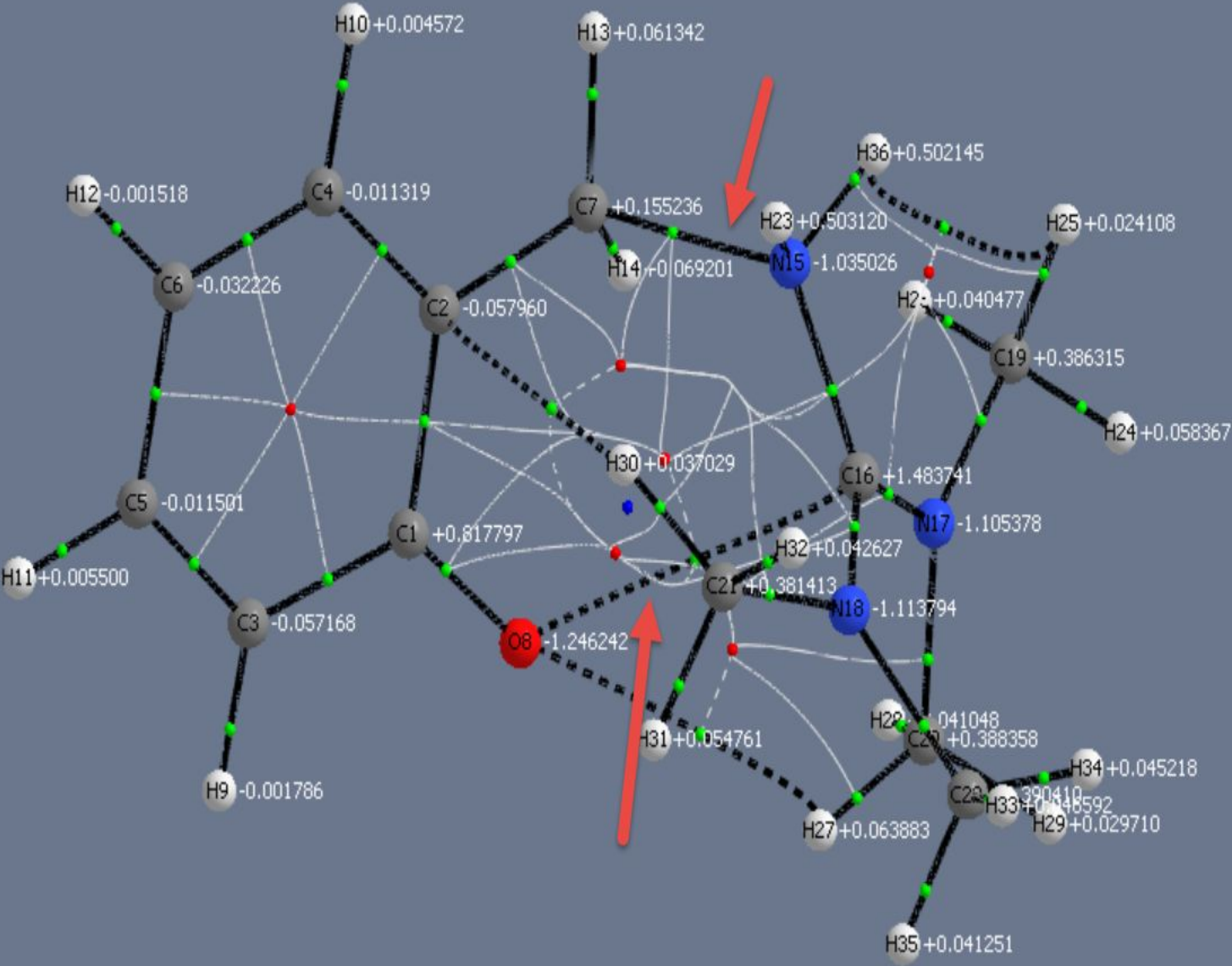
ТМГH⁺ +
o-MX

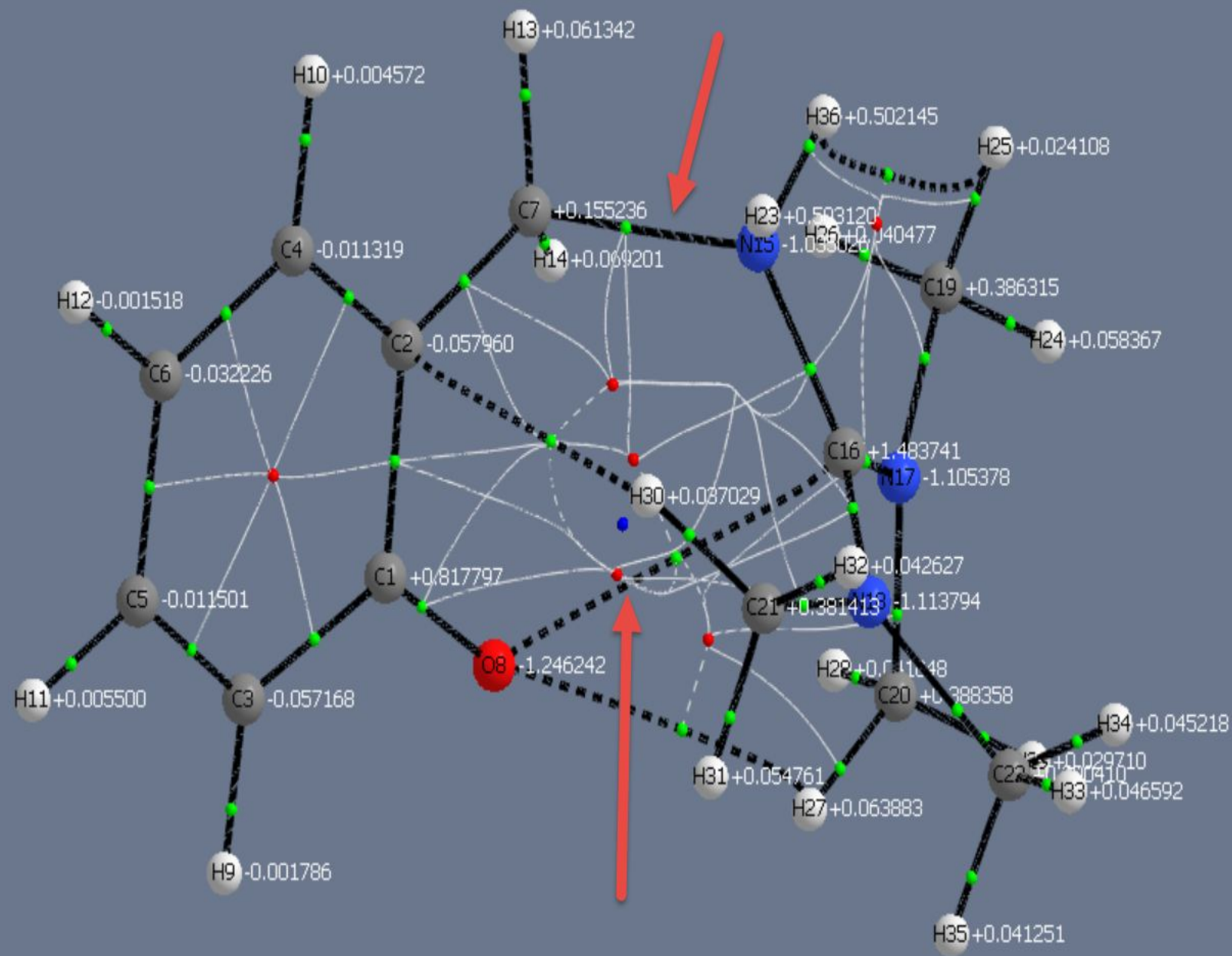
- ПС было успешно найдено

Внутренний путь реакции

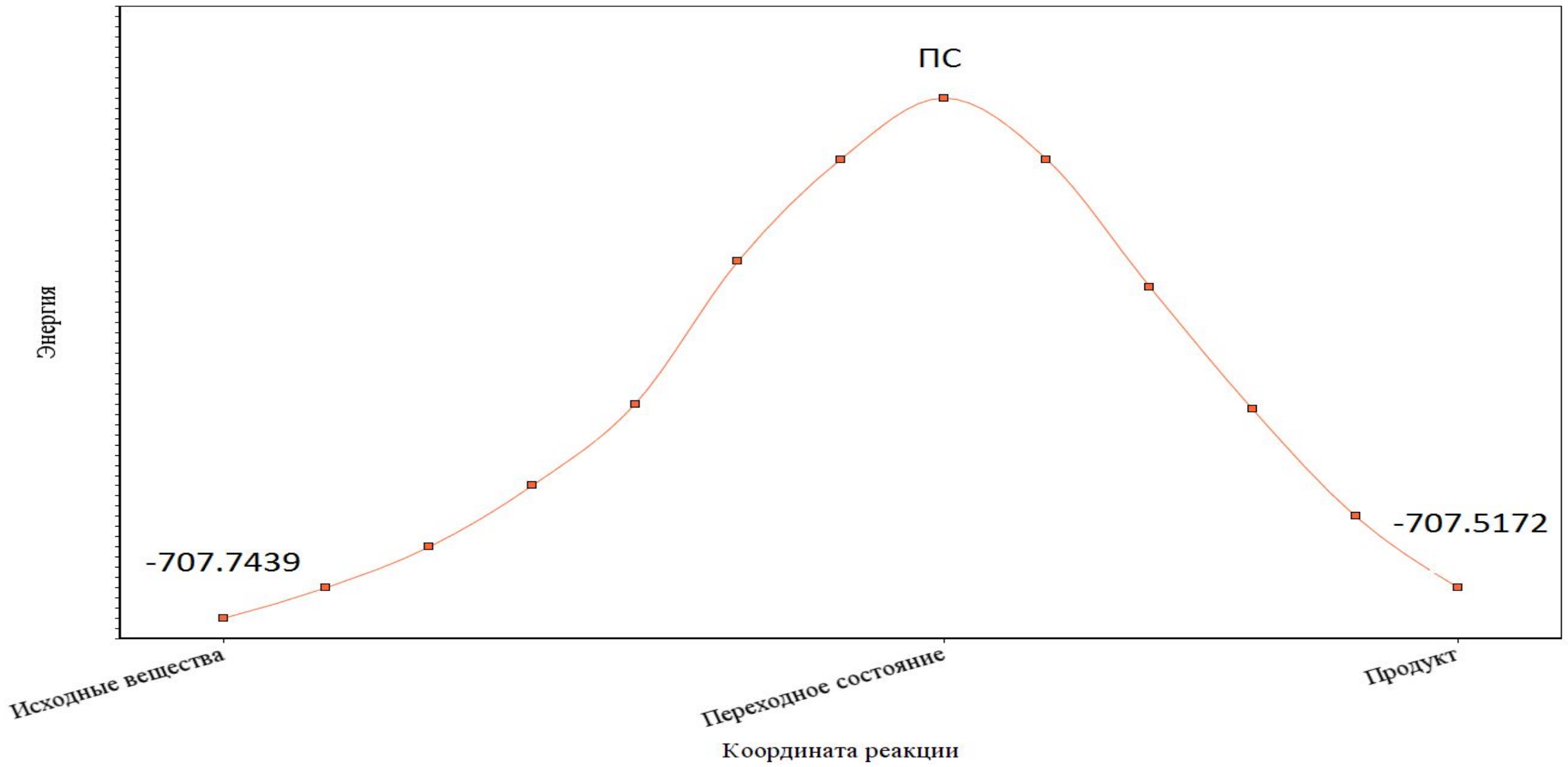








Энергетический профиль реакции



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ!**