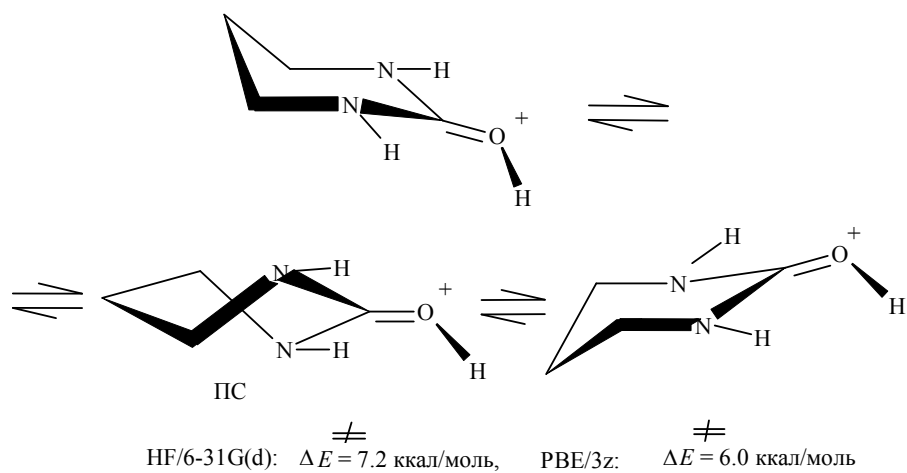
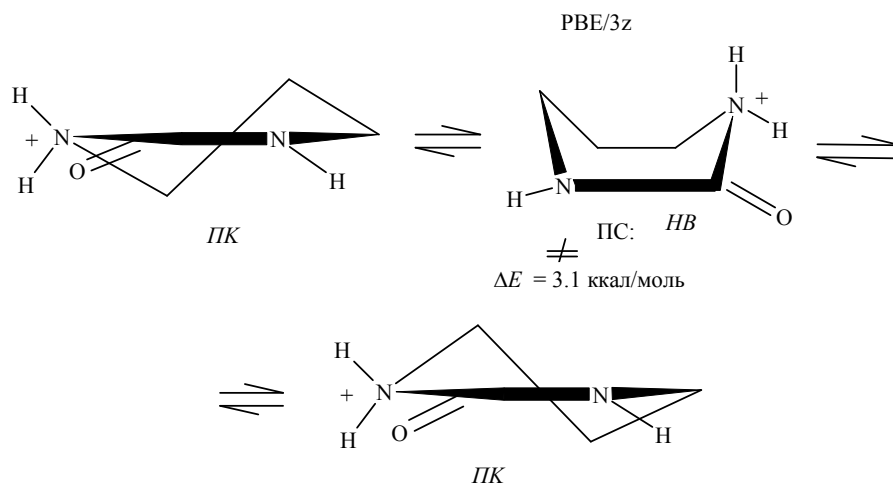


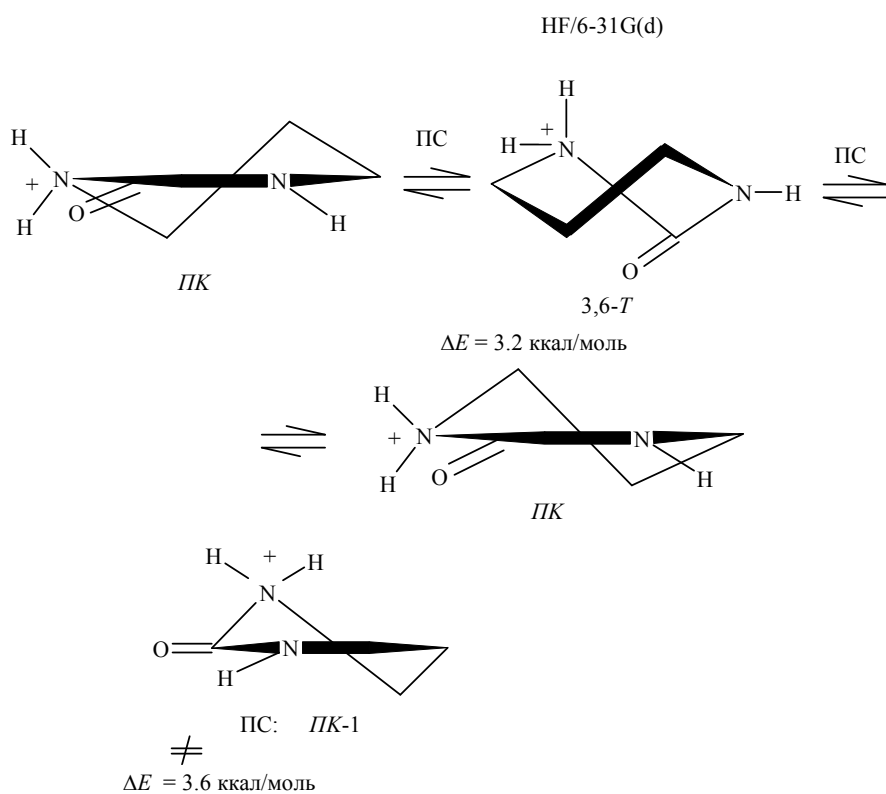
Инверсия цикла оксониевого иона подобна интерконверсии кольца самого гексагидропиримидин-2-она, однако характеризуется более высоким активационным барьером.



В рамках метода PBE/3z конформационное поведение аммониевого иона определяется прямой инверсией между двумя вырожденными по энергии формами полукресла через переходное состояние несимметричной ванны (НВ).



В случае приближения HF/6-31G(d) конформационный переход между двумя вырожденными по энергии формами *полукресла* реализуется в две стадии через промежуточный минимум: *3,6-твист*-форму (3,6-*T*) и переходное состояние, отвечающее конформации *полукресла-1* (*ПК-1*).



Полученные результаты показывают, что протонирование молекулы гексагидропиримидин-2-она существенно влияет на характер конформационной изомеризации цикла, изменяя не только его энергетические параметры, но и сам маршрут инверсии.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. Д. Шуталев, Л. А. Игнатова, *ХГС*, 228 (1991). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **27**, 187 (1991)].
2. А. А. Fesenko, А. D. Shutalev, *Tetrahedron Lett.*, **48**, 8420 (2007).
3. J. Knabe, Н. Р. Büch, J. Biwersi, *Arch. Pharm.*, 79 (1993).
4. R. Tamazyan, А. Ayvazyan, V. Martirosyan, К. Avagyan, А. Martirosyan, *Acta Crystallogr.*, **E64**, o483 (2008).
5. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
6. Д. Н. Лайков, Ю. А. Устынюк, *Изв. АН, Сер. хим.*, 804 (2005).
7. А. Е. Курамшина, С. А. Бочкор, В. В. Кузнецов, *ЖОХ*, **79**, 624 (2009).

**В. В. Кузнецов\***

*Уфимский государственный авиационный  
технический университет,  
ул. К. Маркса, 12, Уфа 450000,  
Республика Башкортостан, Россия*

*Поступило 01.04.2011*

*Уфимский государственный нефтяной  
технический университет,  
ул. Космонавтов, 1, Уфа 450062,  
Республика Башкортостан, Россия  
e-mail: kuzmaggy@mail.ru*