**Теоријско проучавање регио- и стереоселективности [3+2] циклоадиција β-трифлуороацетил винил-етил етра са 3-оксо-1,2-пиразолидинијум илидима**

МАЈНА АГДАДИ\* и НЕСИМ НЕБ

*Одсек за Хемију, Исламски Азад Универзитет, П.П. 755, Бејбал огранак, Бејбал, Иран*

[\*mhaghdadi2@gmail.com](mailto:*mhaghdadi2@gmail.com), Тел.: 0098-11-35242002; Факс: 0098-11-35242002

*ИЗВОД:*

[3+2] циклоадиционе реакције β-трифлуороацетил винил-етил етра (**1**) са супституисаним и несупституисаним 3-оксо-1,2-пиразолидинијум илидима (**2a-2e**) проучаване су коришћењем метода тепроје финкционала густине (DFT) на cc-pVDZ нивоу. Анализирани су механистички деталљи ових реакција, посебно у погледу на регио- и стереоселективност. Анализа релативних енергија придружених различитим реакционим путрвима указује да присуство трифлуороацетил групе у диполарофилу и супституенти на арил прстену приметно утичу на селективност. Такође је нађено да је преферисан *orto-endo* пут са најнижом активационом енергијом, што је у доброј сагласности са експерименталним подацима. Штавише, елиминација етанола из [3+2] циклоадуката и формирање бицикличних пиразолидинона су објашњени како се дао потпун опис укупних домино процеса. Укључивање ефеката растварача повећева активационе енергије и егзотермни карактер циклоадуката, али не мења селективност из гасне фазе. На DFT-у засновани индекси реактвности јасно предвиђају експерименталну региохемију.

*Кључне речи*: DFT студија, трифлуороацетил група, 3-оксопиразолидини-2-ијум илиди , Индекси реактивности, циклоадиционе реакције, бициклични пиразолидинон .