**DFT истраживање Дилс-Алдерове реакције етил-пропиолата на прстенасто-кавезaсти хексацикло [7.5.2.01,6.06,13.08,12.010,14]хексадека-2,4-диен-7,16-дион**

АБДУРАХМАН АТАЛАЈ и РИЗА АБАСОГЛУ\*

*Одсек за Хемију, Кардениц Техничког Универзитета, 61080 Трабзон, Турска*

\*Corresponding author-e-mail address: rabbas@ktu.edu.tr

Извод:Дилс-Алдерова (DA) реакција између прстенасто-кавезастог диена хекса­цикло­[7.5.2.01,6.06,13.08,12.010,14]хексадека-2,4-диен-7,16-диона (HHDD) са циклохекса-1,3-диенским делом етил-пропиолатног (EP) диенофила истраживана је путем DFT методе на B3LYP/6-31+G(d,p) нивоу како би се разјаснио механизам и региоселективне особине реакције. Геометријске и електронске структуре кавезастог диена HHDD и EP проучаване су на B3LYP/6-31+G(d,p) нивоу. Да би се идентификовала фацијална и регио-селективност DA реакције HHDD и EP, проучаване су интеракције граничних молекулских орбитала (FMO) реактаната на основу FMO теорије, и мапе молекулског електростатичког потенцијала HHDD. Површина потенцијалне енергије (PES) сродне DA реакције је израчуната, и урађене су оптимизације прелазних стања и производа који одговарају критичним тачкама на PES на B3LYP/6-31+G(d,p) нивоу, и одређене су њихове конфигурације. Поред тога, термодинамички и кинетички параметри сваке могуће циклоадиционе реакције израчунати су користећи B3LYP/6-31+G(d,p) метод да би утврдили да ли се реакција дешава уз термодинамичку или кинетичку контролу. Термохемијски резултати су показали да је DA циклоадиција кинетички контролисана, и активационе енергије *syn* циклоадиција су ниже од оних код *anti* циклоадиција. Теоријска израчунавања се добро слажу са експерименталним резултатима.

*Кључне речи*:DFT израчунавања; Дилс-Алдерове циклоадиције; са кавезом спојени диени; π-фацијални одабир.