***Ab initio* проучавање механизма настајања spiro-Sn-хетероцикличних једињења циклоадиционом реакцијом H2C=Sn:** **и етилена**

ШАОЏАН ТЕНa,\*, ШЈУХУЈ ЉУ b,\*

a*Школа биолошких наука и технологије,Џајнански Универзитет,Џајнан 250022, Народна Република Кина*

b *Школа за Хемију и Хемијско инжењерство, Џајнански Универзитет, Џајнан 250022, Народна Република Кина*

**Извод:** X2C=Sn: (X= H, Me, F, Cl, Br, Ph, Ar…) Су нове хемијске врсте. Циклоадиционе рекције of X2C=Sn: су ново поље у хемији станилена. Механизам циклоадиционе реакције синглетног H2C=Sn: са етиленом, је у овом чланку по први пут је проучаван коришћењем MP2/GENECP(C, H са 6-311++G\*\*; Sn са LanL2dz) метода. Из профила потенцијалне енергије може се претсказати да реакција има један доминантан реакциони пут. Представљено је реакционо правило да се 5p незаузета орбитала калаја у H2C=Sn: бочно преклапа са везивном π орбиталом етилена формирајући одговарајући интермедијер. Нестабилност интермедијера чини да се он изомеризује у четверочлани прстен станилена. Пошто 5p незаузета орбитала Sn атома у четверочланом прстену станилена и π орбитала етилена формирају *π→p* донорско-акцепторску везу, четверочлании прстен станилена се даље комбинује са етиленом дајући нови интермедијер, а тај се даље изомеризује у spiro-Sn-хетероциклично једињење. Sn у spiro-Sn-хетероцикличном једињењу се комбинује са суседним *sp*3 хибридизованим атомима. Резултат ове студије открива механизам циклоадиционе реакције X2C=Sn: са симетричним π везивним једињењима.

***Кљчне речи:*** H2C=Sn:;Четверочлано прстенасти станилен;spiro-Sn-хетероциклично једињење; профил потенцијалне енергије

ПС. Последња реченица у раду треба да се завршава „ .. is combined with adjacent *sp*3 hybridized atoms.