

Тематическое направление: Влияние среды на реакционную способность. Часть III.

ЧИСЛЕННАЯ МЕРА ПОЛОЖЕНИЯ ПЕРЕХОДНОГО СОСТОЯНИЯ НА КООРДИНАТЕ РЕАКЦИИ.

© **Урядов Владимир Георгиевич⁺ и Офицеров Евгений Николаевич***

Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса 68. г. Казань 420015. Россия. Тел.: (8432) 721-253. E-mail: uryadov@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: реакция диенового синтеза, положение переходного состояния на координате реакции, теория катастроф, влияние среды.

Резюме

Рассмотрена природа и физический смысл величины «х», равной корню четвертой степени синуса собственной частоты колебания изменения энтропии в диссипативной структуре. На основании полинома теории катастроф выведено уравнение для вычисления значений величины х через отношение энергии активации к тепловому эффекту и произведение параметров, численно характеризующих изменение структуры молекул при переходе от реагентов к продуктам. Показано, что величина х имеет смысл численной характеристики положения переходного состояния на координате реакции.