

Исследование поверхности потенциальной энергии реакции бимолекулярного нуклеофильного замещения на основании теории функционала плотности

© Фатеев Александр Владимирович, Акулова Анастасия Олеговна
и Поleshch Олег Хемович*⁺

Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.
пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел. (3822) 59-14-54. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru

* Ведущий направления; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности; B3LYP/DGDZVP; бимолекулярное нуклеофильное замещение; энергетический профиль реакции.

Аннотация

Проведен анализ термодинамических параметров реакций бимолекулярного нуклеофильного замещения в газовой фазе и в растворах с помощью расчетов методом функционала плотности в программных пакетах GAUSSIAN и ADF с использованием ряда полноэлектронных базисных наборов. Рассчитаны геометрии переходного состояния, предреакционного и послереакционного комплексов для реакции $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{F}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{F} + \text{Cl}^-$; проведен сравнительный анализ энергетических профилей реакции в газовой фазе, в воде и тетрагидрофуране.