

Полная исследовательская публикация _____ Тематический раздел: Квантовая химия.
Регистрационный код публикации: 7-12-5-28 Подраздел: Элементоорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей
интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение
элементоорганических соединений”. <http://butlerov.com/synthesys/>
УДК 539.193+544.435.4+547.879.118. Поступила в редакцию 26 декабря 2007 г.

Расчеты методом функционала плотности механизмов реакций модельных молекул салицилфосфита с молекулами непредельных соединений фтороля, хлороля и бромалея

© Савостина Людмила Ивановна¹ и Аминова Роза Мухаметовна^{2+*}

¹ Лаборатория молекулярной фотохимии. Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН.
Сибирский тракт, д. 10/7. г. Казань, 420029. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 292-76-14. E-mail: Savostina@mail.knc.ru

² Кафедра химической физики. Казанский государственный университет. Кремлевская ул., 18.
г. Казань, 420018. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-76-14. E-mail: raminova@rambler.ru

*Ведущий направление; ⁺ Поддерживающий переписку

Ключевые слова: метод функционала плотности, салицилфосфит, хлораль, фтораль, бромаль, реакция Перкова, механизм, элементарные акты, квантово-химические исследования, переходные состояния, интермедиаы.

Аннотация

Изучен механизм бимолекулярных реакций модельных молекул салицил-фосфита с непредельными соединениями хлоралем, бромалем, фторалем в газофазном приближении. Расчеты проводились квантовохимическим методом DFT с использованием функционала плотности PBE в базисе 3z по программе «Природа» (Д.Н. Лайков).

Был изучен механизм реакций как в направлении расширения шестичленного гетероцикла до семичленного, так и реакции, протекающей по типу Перкова.