

Исследование поверхности потенциальной энергии реакции йодирования алканов на основании теории функционала плотности

© Юрьева Анна Геннадьевна,^{1,2} Поleshch Олег Хемович^{1*+}
и Филимонов Виктор Дмитриевич²

¹ 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

² Кафедра органической химии и технологии органического синтеза. Томский политехнический университет. пр. Ленина, 30. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 563-637.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности; *B3LYP/DGDZVP*; радикальное йодирование алканов; энергия активации.

Аннотация

Проанализированы термодинамические параметры свободно-радикального йодирования алканов *трет*-бутилгипойодитом в газовой фазе и в растворах с помощью расчетов методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора *DGDZVP*. Показана термодинамическая возможность йодирования насыщенных углеводородов *t*-BuOI. Вычислены переходные состояния, энергии активации и константы скорости для основных стадий радикального йодирования метана *трет*-бутилгипойодитом. Рассмотрен вклад в процесс йодирования соединения поливалентного йода (*t*-BuO)₃I.