

Исследование механизма реакции образования триазолоксидов с использованием теории функционала плотности

© Зверева Марина Николаевна,¹ Полещук Олег Хемович,^{1*+}
Юрьева Анна Геннадьевна,¹ Долгушина Любовь Викторовна²
и Горностаев Леонид Михайлович²

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 химии. Красноярский государственный педагогический университет. ул. Лебедевой, 89. г. Красноярск, 660049. Россия. Тел.: (391) 223-52-33. E-mail: gornostaev@kspu.ru

* Ведущий направления; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория функционала плотности; *B3LYP/6-31G(d)*; нафтохиноны; механизм реакции.

Аннотация

Проанализированы термодинамические параметры реакции аминирования в газовой фазе и в растворе с помощью расчетов методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора *6-31G(d)*. Показана термодинамическая и кинетическая возможность реакции конденсирования дихлорюглона с анилином. Рассчитаны переходные состояния, энергии активации и константы скорости для реакции конденсирования.