

## Исследование механизма реакции аминирования дихлорнафтохинонов на основании теории функционала плотности

© Зверева Марина Николаевна,<sup>1</sup> Полещук Олег Хемович,<sup>1\*+</sup>  
Долгушина Любовь Викторовна,<sup>3</sup> Огородников Владимир Данилович<sup>2</sup>  
и Горностаев Леонид Михайлович<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 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](mailto:poleshch@tspu.edu.ru)

<sup>2</sup> Лаборатория физико-химических методов исследования. Институт химии нефти СО РАН.  
пр. Академический 5. г. Томск, 634055. Россия

<sup>3</sup> Кафедра химии. Красноярский государственный педагогический университет.  
Ул. Лебедевой, 89. г. Красноярск, 660049. Тел.: (391) 223-52 -33

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

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

### Аннотация

Проведен анализ термодинамических параметров реакции аминирования в газовой фазе и в растворе на основании расчетов методом функционала плотности с использованием полно-электронного базисного набора 6-31G(d) в программном пакете GAUSSIAN'03 и TZ2P+ в программе «Амстердамский функционал плотности». Показана термодинамическая и кинетическая возможность реакции дихлорюглона с анилином. Рассчитаны переходные состояния, энергии активации и проведен анализ орбитальных взаимодействий.