

Исследование механизма реакции аминирования дихлорнафтохинонов на основании теории функционала плотности

© Зверева Марина Николаевна,¹ Полещук Олег Хемович,^{1*+}
Долгушина Любовь Викторовна,³ Огородников Владимир Данилович²
и Горностаев Леонид Михайлович³

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

³ 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.