

Квантово-химическое моделирование маршрута реакции бутена-2 с озоном

© Крисюк Борис Эдуардович,^{1*} Майоров Алексей Владимирович,²
Овчинников Василий Андреевич²⁺ и Попов Анатолий Анатолиевич²

¹ Лаборатория кинетики гетерофазных процессов. Институт проблем химической физики РАН. пр-т Академика Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская область. Россия.

Тел.: (495) 993-57-07. E-mail: bkris@mail.ru

² Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров. Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН. Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия. Тел.: (495) 939-71-93. E-mail: fizhim@rambler.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: озон, двойная связь, многоконфигурационный расчет, согласованное и несогласованное присоединение.

Аннотация

В работе методами квантовой химии выполнен расчет профиля поверхности потенциальной энергии реакции *цис*- и *транс*-бутена-2 с озоном. Расчет выполняли методами MP2, B3LYP, MCSCF, MRMP2 с использованием наборов базисных функций 6-31+G**, 6-311+G**, aug-cc-pVDZ. Размер активного пространства – (10.9) и (14.11). Исследовали два механизма реакции: Криге – согласованное присоединение через циклическое пятичленное переходное состояние (ПС1); и ДеМура – несогласованное присоединение через бирадикальное переходное состояние (ПС2). Показано, что использованные методы хорошо описывают реакцию, энергия активации и значение константы скорости соответствуют экспериментальным данным. Для бутена реакция через ПС1 существенно быстрее, чем через ПС2, то есть в данном случае преобладает механизм согласованного присоединения.