

## Сравнение реакционной способности фтор- и хлорзамещенных этилена по отношению к озону

© Мамин<sup>2\*†</sup> Эльдар Алиевич, Крисюк<sup>1,3\*</sup> Борис Эдуардович  
и Майоров<sup>2\*</sup> Алексей Владимирович

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

<sup>3</sup> Кафедра химии и физики. Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова.

Стремянный пер., 36. г. Москва, 117997. Россия. Тел.: 8 905 503 6933. E-mail: bkris@mail.ru

<sup>2</sup> Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров. Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН. Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия. Тел.: (915) 0180 571, (910) 455 8931. E-mail: yeldar443@mail.ru, hruk@list.ru

\*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, озон, галогензамещенные этилена, энергия активации, константа скорости.

### Аннотация

В работе выполнены квантово-химические расчеты реакции озонлиза монофтор-, моноклорэтилена, 1,1-дифтор- и 1,1-дихлорэтилена. Расчеты проводились в базисном наборе aug-cc-pVDZ, следующими методами: дважды гибридным методом B2PLYP с использованием теории возмущения Моллера-Плессе, многоконфигурационным *ab initio* методом CASSCF с поправками MRMP2 и методом связанного кластера CCSD. Исследовали механизмы согласованного (Криге) и несогласованного (ДеМура) присоединения. Показано, что метод CCSD более точно моделирует данные реакции. В методе MRMP2 из-за неполной оптимизации геометрии имеет место общее занижение константы скорости реакции. Однако в целом относительная зависимость константы скорости реакции от ведения разных заместителей практически такая же, как и в двух других методах: при наличии полярных заместителей роль реакции по каналу несогласованного присоединения возрастает и достигает 50% для 1,1-дифторэтилена и 98% для 1,1-дихлорэтилена.