

Реакция ароматического гидродехлорирования: квантово-химическая диагностика механизма

© Груздев¹ Матвей Сергеевич, Вирзум²⁺ Людмила Викторовна
и Крылов^{3*} Евгений Николаевич

¹ Институт химии растворов РАН. Ул. Академическая, 1. г. Иваново, 153045.

² Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия имени академика Д.К. Беляева. Ул. Советская, д.45. г. Иваново, 153012. Россия. E-mail: virzum@ivgsxa.ru

³ Кафедра физической и органической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, д.39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: enk2000S@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гидродехлорирование, арилгалогениды, электрофильность, функция Фукуи, жесткие и мягкие кислоты и основания Пирсона.

Аннотация

Процесс дегидрохлорирования арил- и гетероарилгалогенидов описан на основе теории жестких и мягких кислот и оснований Пирсона. Обнаружен электрофильный характер стадии, лимитирующей скорость, что определяется корреляцией между логарифмами констант скоростей каталитического гидродехлорирования и локальной электрофильностью реакционного центра. Функция Фукуи и локальная электрофильность как показатель электронодонорной способности реакционного центра представляется надежным дескриптором реакционной способности арилгалогенидов в процессе дегидрохлорирования.