

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Физическая органическая химия. Регистрационный код публикации: 10-23-13-75

Публикация доступна для обсуждения в интернет как материал "Всероссийской рабочей химической конференции "Бутлеровское наследие-2011". <http://butlerov.com/bh-2011/>
Поступила в редакцию 20 октября 2010 г. УДК 547.68+541.124/128.

Тематическое направление: Влияние среды на реакционную способность. Часть 19.

Механизм активации органических реакций в растворе

© Урядов Владимир Георгиевич⁺ и Офицеров Евгений Николаевич*

¹ Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (8432) 63-87-95. E-mail: uryadov@kstu.ru

² Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-87-33. E-mail: oftser@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: основность, потенциал ионизации, электронная энергия.

Аннотация

На примере реакции диенового синтеза разработана теория органических реакций предусматривающая в явной форме взаимодействие молекул растворителя сольватной оболочки с предреакционным комплексом молекул реагентов. Растворитель рассматривается как медиатор, переносчик из окружающей среды к комплексу реагентов энергии, необходимой для преодоления потенциального барьера.