

Влияние заместителей при двойной С=C связи на механизм присоединения озона

© Овчинников Василий Андреевич,¹ Крисюк Борис Эдуардович,^{2*}
Майоров Алексей Владимирович,¹ Мамин Эльдар Алиевич¹
и Попов Анатолий Анатолиевич¹

¹ Лаборатория физико-химии композиций синтетических и природных полимеров. Институт Биохимической физики им. Н.М. Эмануэл РАН. Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119334. Россия. Тел.: (495) 939-71-93. E-mail: fizhim@rambler.ru...

² 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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: озон, этилен, бутен-2, этилен хлорзамещенный, кинетика реакций.

Аннотация

В работе представлены результаты расчета первичной стадии реакции озона с двойной связью этилена, бутена-2, хлорпроизводными этилена (от C₂Cl₄ до C₂H₃Cl). Расчет выполняли *ab initio* методом MRMP2 и методом DFT (B3LYP) с использованием базисов 6-31+G/6-311+G с диффузными функциями и aug-cc-PVDZ. Изучены кинетические закономерности двух путей реакции – согласованное присоединение через симметричное переходное состояние (механизм Криге) и несогласованное присоединение через бирадикальное переходное состояние (механизм ДеМура). Оба эти механизма удалось удачно описать как в однопредельным так и многопредельным приближении. Расчеты подтвердили наличие обоих каналов для всех реагентов и дали разумные величины для констант скорости, согласующиеся с экспериментом.