

Секция “Органическая химия”

Название доклада “Применение квантово-химических расчетов
для изучения механизмов органических реакций”

Коростелев В.О.¹, Ван М.²

¹ Кафедра физической химии

² Кафедра аналитической химии

Современные методы квантовой химии достигли такого уровня, что дают возможность детально изучать механизмы химических реакций на атомно-молекулярном уровне с высокой степенью достоверности, позволяя получать информацию об электронной структуре интермедиатов, переходных состояний и энергетике динамических процессов, протекающих на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). [1]



Рис. 1. Кривая потенциальной энергии химической реакции.

Химическая реакция рассматривается как изменение координат ядер реагирующих молекул вдоль координаты реакции от стационарной точки – реагента реакции (R) к точке, соответствующей продукту реакции (P), через седловую точку, представляющую собой переходное состояние (TS). Существует несколько методов поиска структуры переходного состояния, наиболее часто используемые методы: TS, QST2 и QST3. Для подтверждения структуры переходного состояния, найденного выбранным методом, проводится процедура восстановления координаты реакции (IRC), [2] которая приводит к продуктам и реагентам. Расчет энергий переходного состояния и реагентов позволяет рассчитать энергию активации химической реакции.

Среди методов анализа и определения реакционных центров и реакционной способности молекул часто используются такие методы анализа, как анализ электростатического потенциала (ESP), [3] функции локализации электронов (ELF). [4]

В данном докладе будут приведены физико-химические основы вышеизложенных квантово-химических методов анализа электронной структуры, а также приведены примеры использования данных методов в современных исследованиях механизмов органических реакций.

1. F. Neese, M. Atanasov, G. Bistoni, D. Maganas, S. Ye, J. Am. Chem. Soc., 141 (2019) 2814; IF 14.612
2. K. Fukui, Acc. Chem. Res., 14 (1981) 363; IF 20.834
3. P. Politzer, P. Laurence, K. Jayasuriya, Environ. Health Perspect., 61 (1985) 191; IF 8.341
4. A. Becke, K. Edgecombe, J. Chem. Phys. 92 (1990) 5397; IF 2.991