

РАСЧЕТ МНОГОКОНФИГУРАЦИОННЫМ МЕТОДОМ РЕАКЦИИ БУТЕНА-2 С ОЗОНОМ

Овчинников В.А., Крисюк Б.Э.¹, Майоров А.В., Попов А.А.

Учреждение Российской академии наук Институт биохимической физики, им.
Н.М.Эмануэля, Россия, 119334, Москва, ул. Косыгина д. 4, 8(495)9397193,
fizhim@rambler.ru

¹ Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики,
Россия, 142432, Черноголовка, пр-т Академика Семенова, д.1, 8(49652)43877,
bkris@mail.ru

Изучая влияние деформации двойной C=C связи молекулы бутен-2 на её реакционную способность, с помощью методов квантовой химии, необходимо сравнивать полученные результаты с экспериментом. Такое сравнение для деформированной молекулы не представляется возможным в силу того, что в эксперименте нет возможности растянуть отдельно двойную связь. Единственным способом сравнения является сравнение результатов расчета и эксперимента для недеформированных (свободных) молекул.

В данной работе на примере первой стадии озонолиза бутена-2 подробно исследуются сечения профилей поверхности потенциальной энергии (ППЭ) в случае реакции цис-бутена-2 и транс-бутена-2 с озоном. Расчет сечений ППЭ проводили комбинациями одностерминальных и многостерминальных методов, в различных активных пространствах. Начальная оптимизированная геометрия вдоль всей координаты реакции ищется методами B3LYP, MCSCF в активных пространствах 10 электронов на 9 орбиталях и 14 электронов на 11 орбиталях, далее методом MCSCF с поправками MP2 строится сечение ППЭ вдоль координаты реакции.

В работе показано как работают комбинации методов для симметричного (Криге) и несимметричного (Демур) присоединения озона к бутену-2. Сравниваются полученные данные для энергий активации и констант скорости с экспериментом. Так же в работе показано, что активные пространства для данной системы и данных комбинаций методов не являются аддитивными.