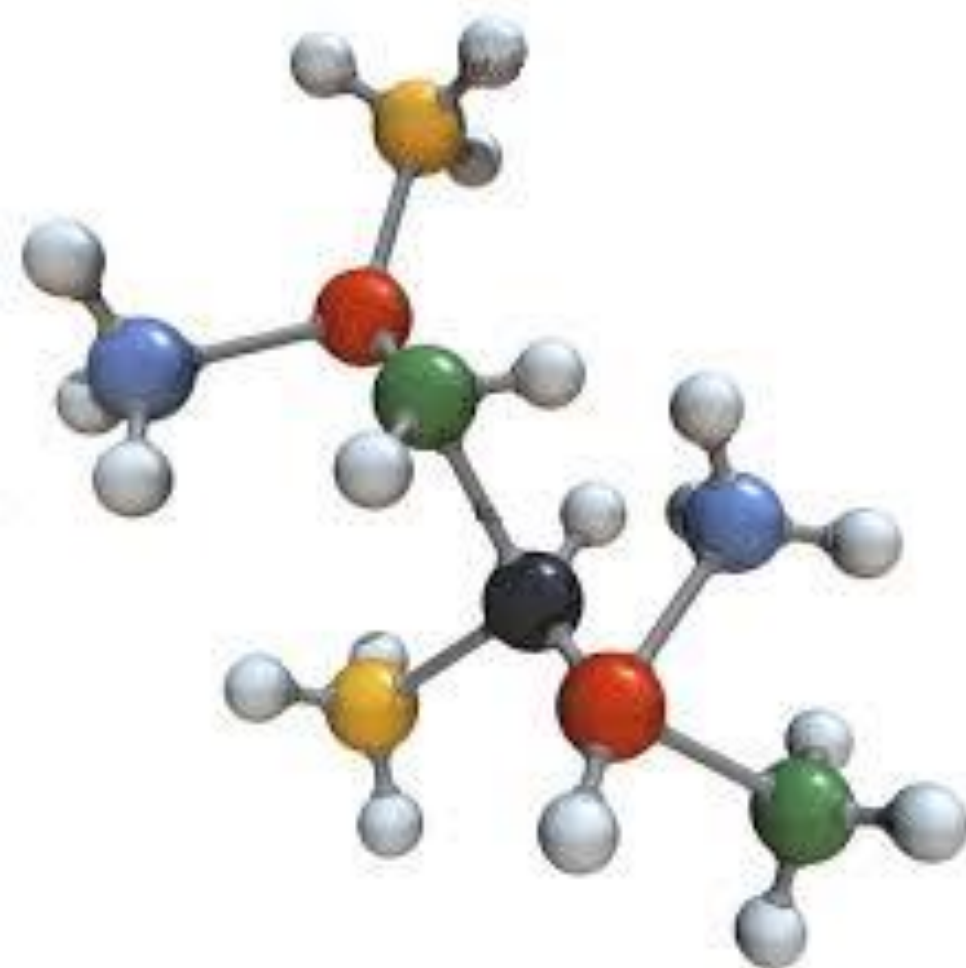


**С.Д. Плехович**

**С. В. Зеленцов**

# Расчет переходных состояний методами квантовой химии

---



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**С.Д. Плехович**

**С. В. Зеленцов**

## **РАСЧЕТ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

*Учебно-методическое пособие*

Рекомендовано методической комиссией химического факультета для студентов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 020100 «Химия» и специальности 020201 «Фундаментальная и прикладная химия»

Нижний Новгород

2015

УДК 544.18  
ББК 24.511.2  
П 38

П 38 Плехович С.Д., Зеленцов С.В. РАСЧЕТ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ. Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2015. – 21 с.

Рецензент: д.х.н., профессор **С.Д. Зайцев**

Изложены методы расчета переходных состояний при помощи квантовой химии. Описаны особенности расчетов при помощи программы GAMESS с участием метода transition state. Содержит пример переходного состояния, инструкцию по работе с программой GAMESS, методику расчета исследуемой реакции, а также задание для самостоятельного выполнения.

Для студентов 4-го и 5-го курсов очной и 5-го курса очно-заочной формы обучения химического факультета ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 020100 «Химия» и специальности 020201 «Фундаментальная и прикладная химия».

Ответственный за выпуск:

председатель методической комиссии д.х.н., профессор **А.В. Маркин**

УДК 544.18  
ББК 24.511.2

© С.Д. Плехович, С.В. Зеленцов, 2015  
© Нижегородский государственный  
университет им. Н.И. Лобачевского, 2015

<b>Содержание</b>	<b>стр.</b>
Введение .....	4
1. Путь реакции. Энергетический барьер. Переходное состояние .....	5
2. Истинная энергия активации элементарной реакции.....	8
3. Поиск переходного состояния при помощи методов квантовой химии .....	9
4. Методы линейного синхронного транзита (TS).....	12
5. Пример переходного состояния, полученного в программе Gaussian.....	14
6. Инструкция по работе с программой GAMESS.....	15
7. Методика расчета исследуемой реакции в программе GAMESS .....	16
8. Вопросы для самоконтроля .....	18
Список литературы.....	19
Приложение. Таблицы оформления результатов работы .....	20

## Введение

За последние десятилетия прогресс в мире компьютерных технологий, а также в модификациях методов квантовой химии позволил производить расчет переходных состояний. Применяя знания и навыки, а также компьютерную технику с установленными на них программами для расчета стало возможным достаточно быстро находить переходные состояния большого числа химических реакций. С созданием методов TS, QST2, QST3 расширилась база для получения новых знаний по механизмам реакций, термодинамическим и кинетическим параметрам реагирующих систем.

### **Цель и задачи учебно-методического пособия**

включают изложение основных вопросов теории переходного состояния в квантовой химии, формирование теоретических представлений о методах поиска максимумов на поверхности потенциальной энергии для последующего использования приобретенных знаний при изучении реакционной способности.

Данное учебно-методическое пособие предусматривает освоение основ поиска переходного состояния реакции бимолекулярного нуклеофильного замещения на примере гидролиза этилбромида.

## 1. Путь реакции. Энергетический барьер. Переходное состояние

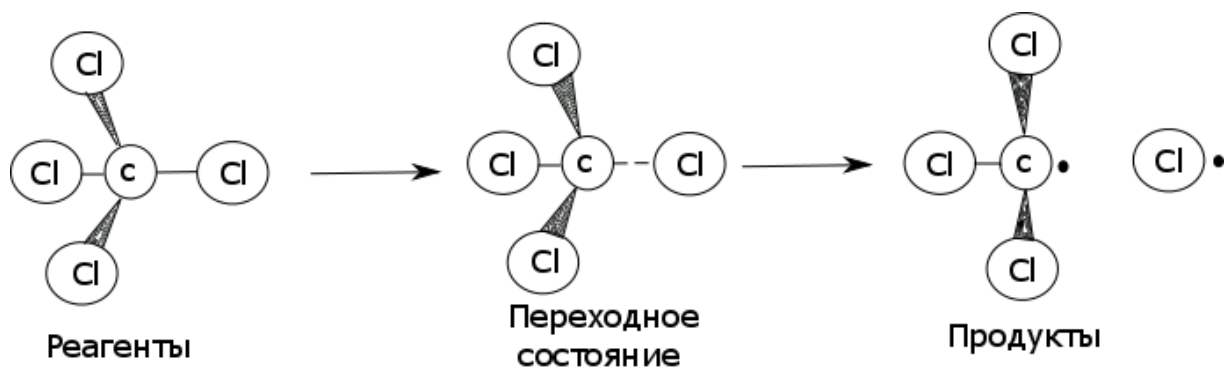
Знакомство с методологией поиска переходных состояний в химической кинетике начнем с изучения основных понятий теории переходного состояния.

Путь реакции – совокупность переходных состояний, через которые проходит система в течение элементарного акта. Путь реакции может представлять собой непрерывный спуск или подъем из долины реагентов в долину продуктов (рис. 1). Под долиной продуктов и реагентов понимается два минимума энергии продуктов и реагентов. Более наглядно этот процесс можно представить при взаимодействии двух одноатомных молекул с образованием двухатомной (например  $\text{Cl} + \text{Cl} \leftrightarrow \text{Cl}_2$ ). При этом взаимное расположение атомов будет характеризоваться одной координатой реакции - расстоянием между ними. Энергия, являющаяся функцией расстояния, называется кривой потенциальной энергии, которая возрастет от расстояния  $r = r_0$ , соответствующего равновесной длине связи в молекуле до бесконечности в области малых расстояний и до нуля в области больших расстояний.



Рис. 1. Кривая потенциальной энергии химической реакции

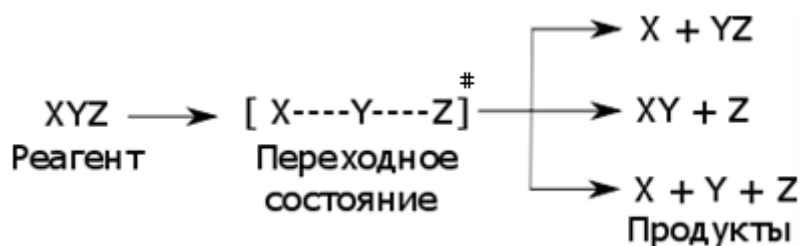
В наиболее распространенном случае система при перемещении из долины реагентов в долину продуктов проходит через промежуточную область с энергией, превышающую потенциальную энергию, как исходного компонента(ов), так и конечного продуктов. Говорят, что в ходе элементарного акта химического превращения система должна преодолеть потенциальный барьер. Поскольку пути реакции могут быть различны, то и высота этого барьера также может изменяться. Но на ППЭ должна существовать точка, через которую проходит путь, имеющий самый низкий энергетический барьер. Геометрия молекулярной системы, соответствующая этой точке, и получила название переходного состояния или активированного комплекса (рис. 2).



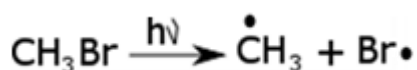
**Рис. 2.** Схематическое изображение реакции дегалогенирования тетрагалометана. Пунктиром помечены разрывающиеся связи

Химические реакции бывают элементарными и сложными. Элементарные реакции подразделяются на три основных типа.

1. Мономолекулярные реакции, в которых участвует только одна молекула. Чаще всего они являются реакциями распада и изомеризации молекул. В этом случае геометрия молекулярной системы в переходном состоянии соответствует искаженной геометрии исходной молекулы.

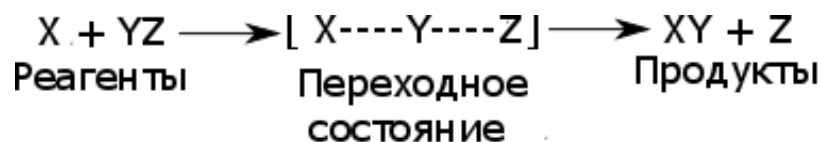


В частности, разрыв связей возможен под действием света или при нагревании, например:



В случае фотохимической реакции исходная молекула в начале поглощает квант света и переходит в возбужденное состояние, причем и распад и изомеризация могут протекать в электронно- и колебательно- (реже – вращательно) возбужденном состоянии.

2. В бимолекулярных реакциях происходит столкновение двух частиц с образованием общей молекулярной системы, которая претерпевает изменение некоторых геометрических параметров в ходе химической реакции. Переходное состояние образуется из такой объединенной молекулы.



Примером может служить следующая реакция:



3. В тримолекулярных реакциях одновременно сталкиваются три молекулы, например:



Из-за малой вероятности тройного столкновения трех молекул одновременно, тримолекулярные реакции протекают достаточно редко. И в этом случае переходное состояние соответствует искаженной геометрии объединенной молекулы из трех молекул. Непрерывное преобразование этой молекулярной системы и приводит к продуктам реакции.

Сложная реакция включает совокупность элементарных реакций, причем число элементарных реакций может быть достаточно большим.



## 2. Истинная энергия активации элементарной реакции

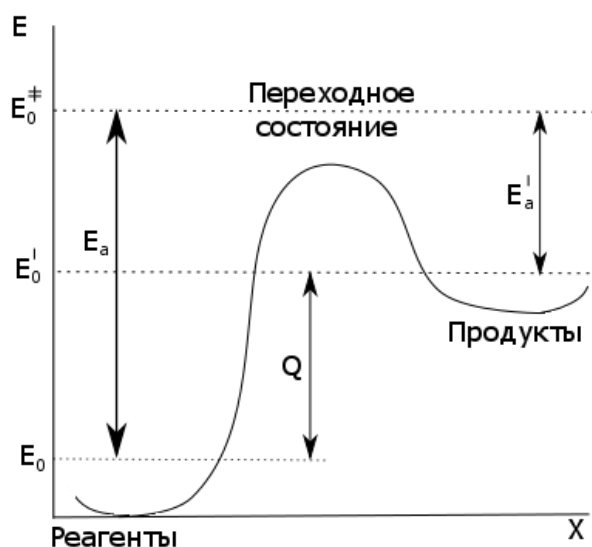
Если система атомов в исходном состоянии имеет энергию меньшую, чем  $E_0^\ddagger$  (нулевая энергия активированного комплекса), то она не сможет преодолеть барьер, разделяющий исходное и конечное состояние. В такой системе химическая реакция произойти не может, система - химически неактивна и нуждается для активации в подводе дополнительной энергии. Так как энергия исходной системы не может быть меньше ее нулевой энергии, то для активации любой системы достаточно сообщить ей дополнительную энергию, равную

$$E_a = E_0^\ddagger - E_0,$$

где  $E_0^\ddagger$  - энергия переходного состояния, а  $E_0$  - энергия молекулярной системы в исходном состоянии. Эта величина получила название «истинной энергией активации реакции» и представлена на рис. 3.

По определению, истинной энергией активации элементарного акта химического превращения называется минимальная энергия, которой должна обладать исходная молекулярная система сверх своей нулевой энергии (т.е. энергии исходной молекулярной системы или реагентов), чтобы в ней могло пройти рассматриваемое химическое превращение. Как правило, энергия активации относится не к одному элементарному акту, а к молю реагирующих частиц и измеряется в килоджоулях или килокалориях, отнесенных на один моль. Любой процесс, сопровождающийся выделением энергии, является экзотермическим, а поглощением – эндотермическим.

Истинную энергию активации экзотермического процесса обычно называют активационным барьером.



**Рис. 3.** Соотношение между истинными энергиями активации прямого и обратного процессов и тепловым эффектом реакции, где  $E_0$  - нулевая энергия частиц реагентов,  $E_0^\ddagger$  - нулевая энергия активированного комплекса,  $E_0^I$  - энергия продуктов реакции,  $E_a$  - истинная энергия активации прямой реакции,  $E_a^I$  - истинная энергия активации обратной реакции,  $Q$  - тепловой эффект реакции при абсолютном нуле

### 3. Поиск переходного состояния при помощи методов квантовой химии

В случае многомерной ППЭ переходное состояние - это седловая точка первого порядка. В качестве примера можно сослаться на точку "С" на рис. 4.

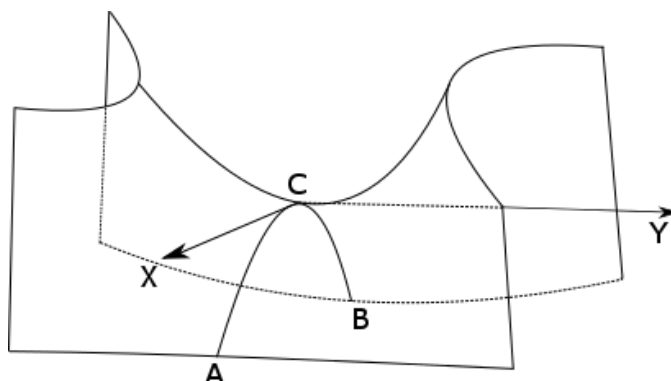


Рис. 4. Седловая точка на поверхности второго порядка

Седловая точка означает, что в одном направлении пространства энергия имеет максимум (максимальна), в то же время, как во всех других (ортогональных) направлениях энергия минимальна.

Рассмотрим модельную реакцию  $AB + C \leftrightarrow A + BC$ , протекающую так, что все атомы находятся на одной линии (рис. 5).

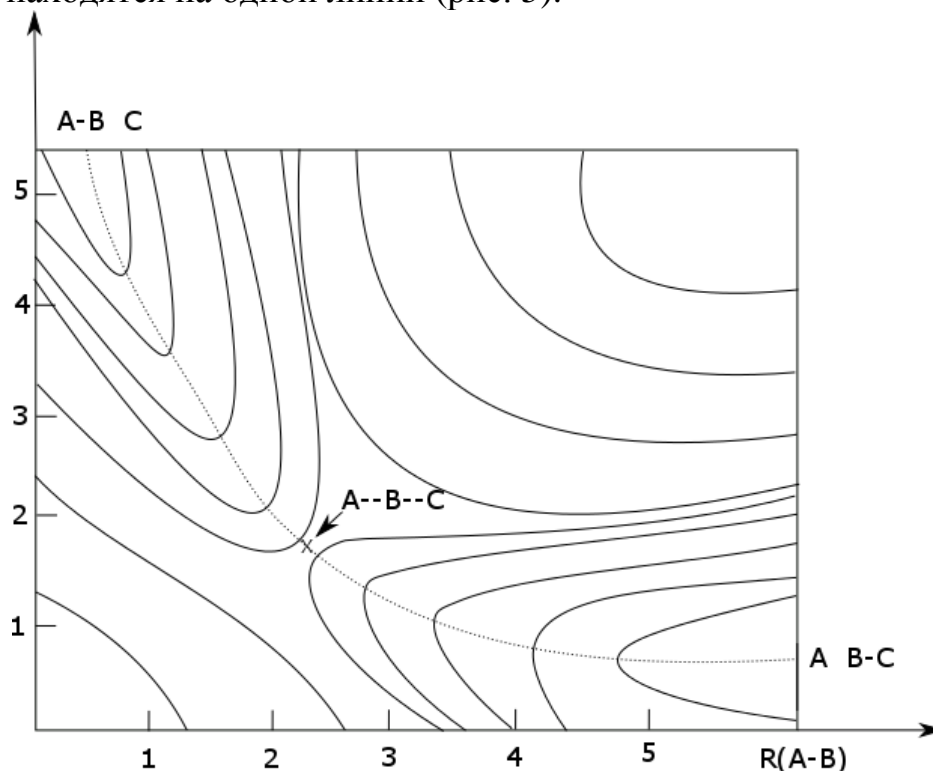


Рис. 5. Поверхность потенциальной энергии реакции  $AB + C \leftrightarrow A + BC$ .  
Здесь положение седловой точки отмечено "крестом"

С увеличением расстояния  $R(A-B)$  энергия системы возрастает до тех пор, пока не будет достигнута точка переходного состояния (на рис. 6 она отмечена крестом). В переходном состоянии атом В уже частично связан с атомом С, но в

тоже самое время он еще остается связанным с атомом А. Таким образом, смещение от точки, соответствующей переходному состоянию, приводит к одновременному увеличению или уменьшению расстояний R(A-B) и R(B-C) и увеличению энергии. Но при перемещении, соответствующему уменьшению одной из длин связей при одновременном увеличении другой связи, энергия понижается. Другими словами, имеется одна положительная и одна отрицательная кривизна поверхности потенциальной энергии, т.е. матрица Гессе имеет одно положительное и одно отрицательное собственное значение. Дальнейшее уменьшение длины связи B-C и увеличение R(A-B) приводят к продуктам реакции.

С математической точки зрения Гессиан функции - симметрическая квадратичная форма вида

$$H(f) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{vmatrix}$$

Определитель этой матрицы называется определителем Гессе, или просто гессианом.

В программе GAMESS силовые константы, характеризующие частоты колебаний атомов друг относительно друга, преобразуются в масс-взвешенные прямоугольные координаты.

$$f_{MBij} = \left( \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0,$$

где  $q_i$  и  $q_j$  – масс-взвешенные координаты атомов  $i$  и  $j$ .

Копия силовых констант в масс-взвешенных координатах диагонализуется в матрицу этой квадратичной формы, образованной вторыми частными производными функции.

Если гессиан - положительно определен, то  $x_0$  - точка локального минимума функции  $f(x)$ . Если гессиан отрицательно определен, то  $x_0$  - точка локального максимума функции  $f(x)$ . Далее происходит расчет частот колебаний. Силовые константы рассчитываются по формуле

$$K_i = 4\pi^2 \nu^2 \mu_i.$$

Волновое число можно вычислить по формуле

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K_i}{\mu_i}},$$

где  $\mu_i$  - это приведенная масса молекулы.

Таким образом, если силовая константа ( $K_i$ ) имеет отрицательное значение, т.е. максимум функции – переходное состояние, то и волновое число является мнимым числом. В целом поиск переходных состояний и оценка реакционных барьеров может быть довольно сложной задачей.

Первым ее шагом является формирование разумного предположения о структуре переходного состояния, о начальной геометрии, о выборе системы координат. Однако, не всегда легко решить эту задачу, особенно, если переходных состояний для данной реакции несколько. Кроме того вычислительные методы, основанные на методологии молекулярных орбиталей могут быть менее точными для переходных состояний, чем для минимумов на ППЭ. Часто требуется довольно высокий уровень теории, чтобы получить хорошую и качественную оценку величины реакционного барьера.

Остановимся более подробно на описании вычислительных методов поиска геометрической структуры переходного состояния.

В программе GAMESS реализован только метод TS. В Gaussian 03 реализовано три метода для поиска переходного состояния: TS, QST2 и QST3. Остановимся немного подробнее на описании этих методов.

#### 4. Методы линейного синхронного транзита (TS)

Рассмотрим метод прямого поиска переходного состояния – Transition State (TS) более подробно. Этот способ требует задания нулевого приближения для геометрической структуры переходного состояния, например, на основании анализа энергетического эффекта реакции (постулат Хэммонда). Согласно этому постулату, если реакция эндотермическая, то структура переходного состояния должна быть близка к структуре продуктов реакции; если реакция экзотермическая – к структуре реагентов; если реакция теплонейтральная – то структура переходного состояния лежит примерно посередине между реагентами и продуктами. Кроме того, для построения нулевого приближения для геометрической структуры молекулярной системы в переходном состоянии можно воспользоваться имеющейся информацией о переходных состояниях для похожих по структуре и функциональности молекулярных систем, имеющимися данными о качественном и количественном составе продуктов реакции и т.п.

Методы квадратичного синхронного транзита (QST2 и QST3) подразделяются на два типа. Первый из них основан на методе линейного транзита, в котором сначала выполняют поиск максимума в сечении ППЭ по линии, соединяющей реагенты и продукты. Затем осуществляют нахождение переходного состояния, как минимума в сечении ППЭ по линии, перпендикулярной к линии, соединяющей реагенты и продукты. Она проходит через точку максимума, найденного на первом шаге (в программе Gaussian – Quadratic Synchronous Transit Approach (QST2)). Во втором типе методов находят максимум в сечении ППЭ, имеющей вид параболы, проведенной через три точки – координаты соответствующих атомов в реагентах, исходной структуре и переходном состоянии, заданном исследователем, и продуктам реакции. Затем, осуществляют поиск седловой точки в сечении ППЭ по линии перпендикулярной касательной к параболе, которая соответствует точке максимума параболического сечения (в Gaussian – Quadratic Synchronous Transit Approach (QST3)).

Подведем некоторый итог по процедуре поиска переходного состояния.

Процедура поиска переходного состояния может быть достаточно сложной, даже для простых систем, поэтому важно выработать критерии, по которым можно определить, что найденная геометрия соответствует переходному состоянию. Переходное состояние в соответствии с теоремой Марелла-Лейдлера характеризуется наличием именно одной отрицательной частоты (если быть точным: наличием одного отрицательного собственного значения матрицы Гессе). При этом следует обратить внимание на следующие требования.

1. Необходимо задать правильные начальные координаты атомов для поиска переходного состояния. В частности, требуется проверить соответствие длин связей табличным значениям. Рекомендуется увеличить длину связей у атомов, которые непосредственно будут участвовать в реакции, на 15-20% по сравнению с равновесными.

2. При построении предполагаемого переходного состояния следует начинать, исходя из геометрии реагентов или продуктов реакции. Переходное состояние, как правило, находится где-то посередине, что упрощает сам поиск.

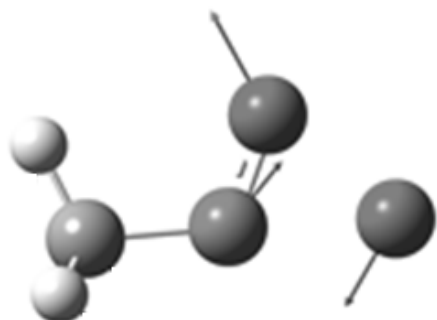
3. Проверить соответствие в нумерации атомов у исходных и конечных структур при использовании метода QST2 и QST3. Каждому атому в структуре присваивается свой номер, которому приписываются свои координаты.

4. После проведения расчета переходного состояния проверить наличие одного и только одного отрицательного собственного значения гессиана.

5. После проведения расчета переходного состояния необходимо определить путь реакции, как линию наискорейшего спуска в пространстве. Для этого можно применить, например, метод восстановления координаты реакции (IRC). Спуск начинается из переходного состояния в направлении, определяемым переходным вектором и заканчивается в долине продуктов.

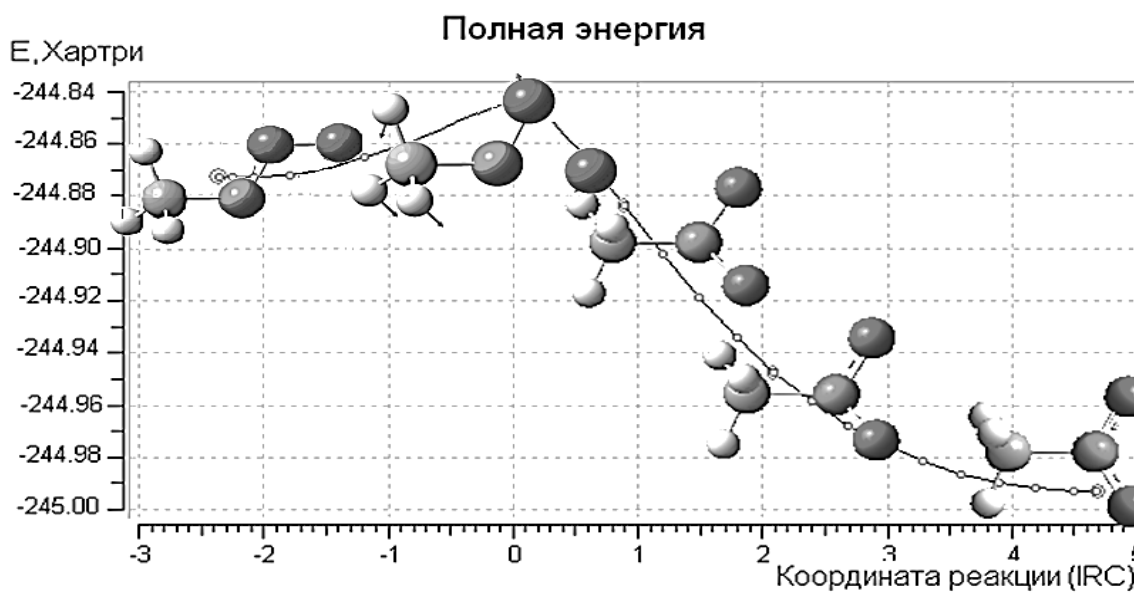
## 5. Пример переходного состояния, полученного в программе Gaussian

В качестве примера рассмотрим реакцию изомеризации нитрозооксида *транс*-  $\text{CH}_3\text{NOO}(\text{T}_1) \leftrightarrow \text{CH}_3\text{NO}_2(\text{T}_1)$  [6]. На рис. 6 показано переходное состояние. Значение величины мнимой частоты, а также рассчитанные энергии активации для данной реакции, которые составили 3.17 и 30.60 ккал/моль, соответственно. Расчет переходного состояния позволяет узнать не только геометрию, но и значение электронной энергии рассчитываемой молекулярной системы.



**Рис. 6.** *Транс*-триплетное ПС. Мнимая частота  $173i \text{ см}^{-1}(\text{T}_1)$ . Стрелками показаны вектора смещения атомов

После расчета переходного состояния произведен расчет IRC (Процедуры восстановления координаты реакции), который показал, что имеет место максимум, соответствующий переходному состоянию и два минимума, соответствующие исходным компонентам и продукту реакции (см. Рис. 7).



**Рис. 7.** Процедура восстановления координаты реакции (метод IRC)

Выполнив расчет переходного состояния, можно определить не только вероятность протекания реакции и различные термодинамические параметры, но также предсказать механизм реакции, что является по сути одним из показателей глубокого понимания реакционного превращения.

## 6. Инструкция по работе с программой GAMESS

Остановимся более подробно на расчете переходного состояния в программе GAMESS. Во-первых, необходимо изучить основные действия по запуску программы GAMESS.

1. Запустить терминал (если установлена система Linux) или выполнить команду пуск и прописать cmd (если установлена система windows), затем ввести команду `cd c:\game.64`, где `c:\` директория в которую установлен GAMESS.

2. При помощи скрипта `run.64` производится запуск программы GAMESS. Скрипт `run.64` содержит 4 аргумента.

**`run.64 [input] [version] [ncpus] [ppn] [logfile]`**

[input] = Имя входящего файла

[version] = Версия GAMESS

[ncpus] = Количество ядер на компьютере (по умолчанию: 1)

[ppn] = Число компьютеров. По умолчанию для запуска на одном компьютере.

[logfile] = Имя .log файла. Результаты расчета представляются в виде файла с расширением log.

Например, запуск задачи `1.inp` в GAMESS версии 11-64 на одном компьютере с log файлом `1.log` будет осуществлен следующей командой **`run.64 1.inp 11-64 1 0 1.log`**.

Рассмотрим ряд команд, выполняющих те или иные действия в программе GAMESS.

RUNTYPE тип вычисления

= ENERGY Молекулярная энергия.

= GRADIENT Расчет молекулярной энергии градиента.

= HESSIAN Энергия молекулы + градиент + вторые производные, включая гармонические

= OPTIMIZE Оптимизация молекулярной геометрии

= SADPOINT Локализация переходного состояния.

= CONICAL Нахождение конических точек пересечения двух потенциальных

= IRC Восстановление внутренней координаты реакции.

= GLOBOP Поиск глобального минимума методом Монте-Карло.

= SURFACE Сканирование сечения поверхности потенциальной энергии.

= COMP Термохимический расчет, включающий метод G3MP2

= G3MP2 Оценка энтальпий образования, применяя G3(MP2,CCSD(T)) методологию.

= PROP Расчет свойств молекул.

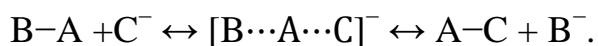
= RAMAN Расчет Рамановского спектра

Больше команд можно посмотреть на сайте разработчика или в инструкции, прилагаемой к программе.

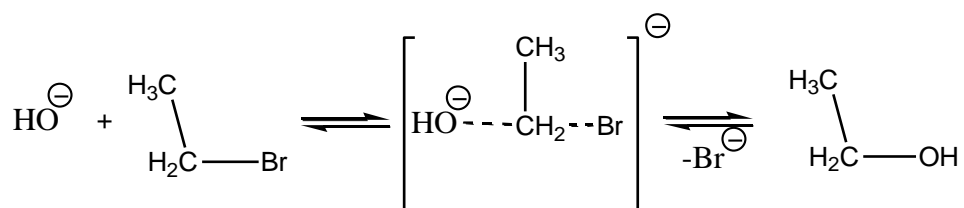


## 2. Методика расчета исследуемой реакции в программе GAMESS

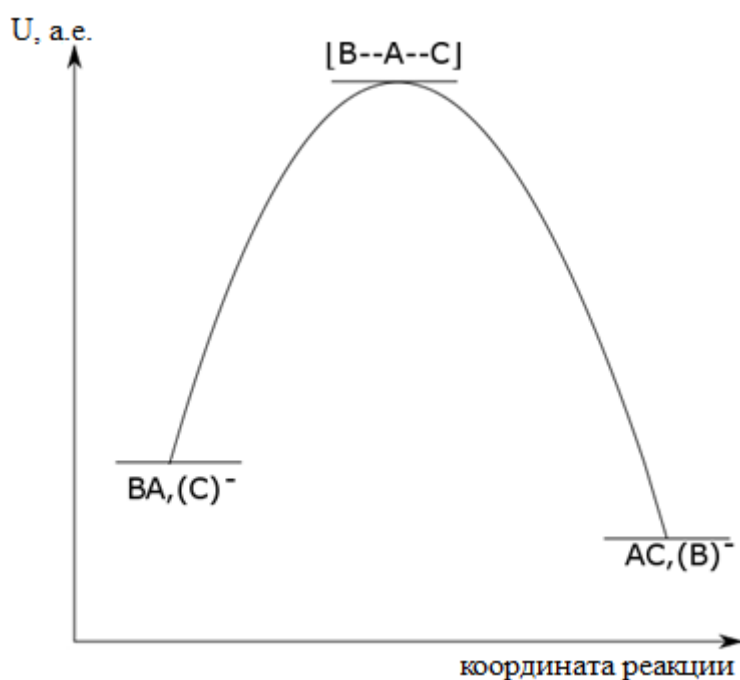
Остановимся более подробно на реакции, которую будем исследовать в данной лабораторной работе. В целом, механизм реакции  $S_N2$  или реакции бимолекулярного нуклеофильного замещения происходит в одну стадию, без промежуточного образования интермедиата. При этом атака нуклеофила и отщепление уходящей группы происходит одновременно:



Примером реакции  $S_N2$  является гидролиз этилбромида:



Типичный вид энергетического профиля реакции бимолекулярного нуклеофильного замещения представлен на следующей диаграмме (Рис. 8).



**Рис. 8.** Энергетический профиль реакции бимолекулярного нуклеофильного замещения

Для моделирования указанной реакции можно применить следующий порядок действий.

1. Построить структуру ( $\text{OH}^- + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ ). Для построения можно воспользоваться следующими программами: *gabedit*, *avogadro*, *chemcraft* (условно-бесплатная).

2. Оптимизировать геометрию молекулярной системы. Перед оптимизацией необходимо правильно подобрать метод и базис расчета. Это делается путем

сравнения экспериментальных результатов с теоретическими для исследуемой системы. Кроме того, учитывается не только сходимость результатов, но и время расчета системы. Для расчета частот в конце оптимизации можно воспользоваться командой `hssend = .T`.

3. Вычислить частоты для уже оптимизированной геометрии, с целью проверки наличия мнимой частоты. (Если они не вычислены в шаге 2).

4. Если в расчетном спектре молекулярной системы есть мнимая частота, то можно использовать эту геометрию в качестве отправной точки для поиска переходного состояния.

5. Произвести расчет переходного состояния. (Для расчета TS необходимо ввести информацию о гессiane, содержащемся в частотной группе \$ HESS в конце файла DAT-GAMESS).

6. Убедиться, что найденное переходное состояние и частота удовлетворяют условиям задачи. (Визуально видно, что трансляция атома происходит в сторону образования продуктов реакции или исходных веществ).

7. Произвести расчет IRC. (Убедиться, что происходит спуск из переходного состояния в долину продуктов, соответствующих исследуемой системе).

Для ускорения поиска переходного состояния рекомендуется вводить следующую команду: `ihrep = 5`. Это приводит к тому, что частоты пересчитываются на каждом 5-м шаге. Но ввод этой команды может достаточно сильно повлиять на время расчета.

Следует обратить внимание, что исследуемую реакцию можно рассчитать как в газовой фазе, так и с учетом влияния растворителя. При расчете аналогичной системы гидратация существенно меняет профиль потенциальной энергии, но при этом траектория движения исходных компонентов остается практически неизменной.

## 8. Вопросы для самоконтроля

1. Какие основные программы для квантово-химических расчетов Вы знаете? Их применение.
2. Что называют переходным состоянием?
3. Дайте определения следующим понятиям: истинная энергия активации элементарной реакции, путь реакции, энергетический барьер, переходное состояние.
4. Дайте определение молекулярности химической реакции. Приведите примеры сложных и элементарных реакций.
5. Опишите процедуру поиска переходного состояния при помощи различных методов квантовой химии.
6. В чем заключаются методы TS, QST2, QST3?
7. Теорема Марелла-Лейдлера, ее применение? Дайте определение понятию мнимая частота.

## Список литературы

1. В.В. Еремин, С.И. Каргов. Основы физической химии теория и задачи. – М.: «ЭКЗАМЕН», 2005. - 470 с.
2. Н.М. Эмануэль, Д.Г.Кнорре. Курс химической кинетики. – М.: ВШ, 1984. - 463с.
3. В.Б. Кобычев. Квантовая химия на ПК. Компьютерное моделирование молекулярных систем: учебно-методическое пособие. – Иркутск: Иркут. гос. ун-т, 2006. - 87 с.
4. Р. Фларри. Квантовая химия. – М.: МИР, 1985. - 472 с.
5. Т.Кларк. Компьютерная химия. Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы. – М.: МИР, 1990. – 385 с.
6. С.Д. Плехович, С.В. Зеленцов, А.Д. Плехович. Квантово-химическое изучение изомеризации нитросоединений в триплетном состоянии. - Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2013, № 6-1, С. 113-118.

**Приложение. Таблицы оформления результатов работы**

Таблица 1

Подбор метода для проведения расчета реакции гидролиза этилбромида

Метод расчета	r(C(1)-Br))	r(C(1)-C(2))	r(CBr)-r(C(1)-C(2))	Время расчета
DFT/uB3LYP				

Таблица 2

Результаты расчета энергии молекул и энергии активации

Значение энергии молекул исходных компонентов (а.е.)	Значение энергии молекул продуктов (а.е.)	Значение энергии переходного состояния (а.е.)	Энергия активации (ккал/моль)

Таблица 3

Результаты расчета энергии молекул и энергии активации

Изображение ПС	Частоты колебаний ПС
	Значение мнимой частоты, см <sup>-1</sup>

Таблица 4

Результаты расчета IRC

Изображение IRC
-----------------

Сергей Дмитриевич Плехович  
Сергей Васильевич Зеленцов

**РАСЧЕТ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ  
ХИМИИ**

*Учебно-методическое пособие*

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».  
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.