

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ КАТАЛИЗ БЕНЗОАТАМИ
ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ РАСПАДА ПЕРОКСИДА БЕНЗОИЛА.
КИНЕТИКА И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

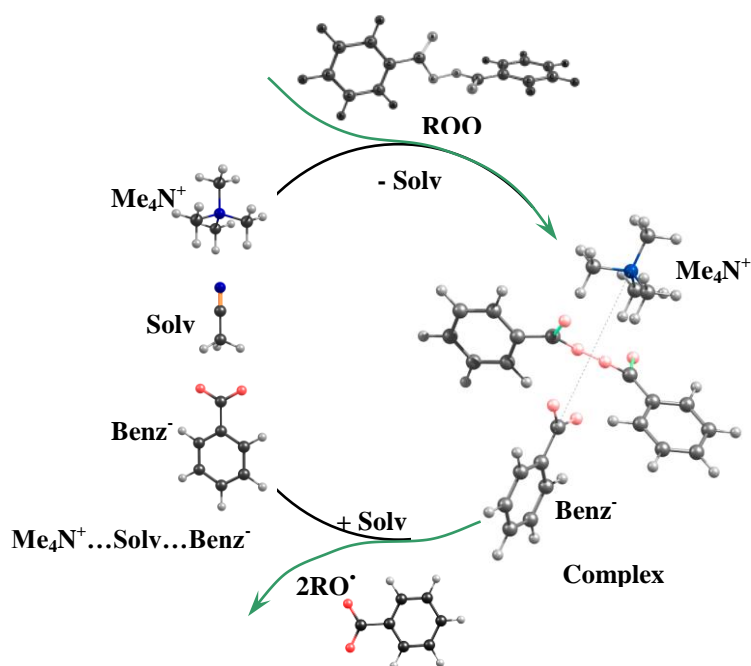
**Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак, Е.В. Ракша, Н.А. Голубицкая¹,
И.А. Опейда², Т. Гайдамака, А. Букрей**

Донецкий национальный университет, г.Донецк, Украина

¹*Национальный медицинский университет им. А.А. Богомольца, г. Киев, Украина*

²*Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАНУ*

Бензоаты тетраалкиламмония (Alk_4NBenz) катализируют распад пероксида бензоила (ROOR): при 323 К и пятидесятикратном избытке ROOR в системе скорость активированного Me_4NBenz распада пероксида превышает скорость его термоллиза в 30 раз. Причина повышения реакционной способности ROOR в присутствии Alk_4NBenz – химическая активация пероксидной связи. Эксперимен-



тально показано влияние природы как аниона, так и катиона соли на кинетику протекания реакции. Рассматривается совместное действие катиона и аниона при образовании супрамолекулярного комплекса пероксида и солей четвертичного аммония. Оптима-

лизация геометрии и расчет энергетических характеристик пероксида, ионов и комплексов выполнены методом AM1 и на уровне B3LYP/6-31G(d,p). Реакционно-активный комплекс (Complex), который образуется при взаимодействии ROOR с сольваторазделенной ионной парой ($\text{Me}_4\text{N}^+\dots\text{Solv}\dots\text{Benz}^-$) распадается с образованием двух ацилоксирадикалов.