

Тематическое направление: Строение и механизм мономолекулярного распада C-, N-, O-нитросоединений. Часть IV.

РОЛЬ НИТРО-НИТРИТНОЙ ПЕРЕГРУППИРОВКИ В МЕХАНИЗМЕ МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПАДА АЛИФАТИЧЕСКИХ НИТРОСОЕДИНЕНИЙ.

© Николаева Екатерина Валерьевна, Шамов Александр Георгиевич,^{†*}
Чачков Денис Владимирович, Гордеев Дмитрий Александрович
и Храпковский Григорий Михайлович*

Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. Тел: (8432) 362-075. E-mail: shamov@kstu.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: механизм реакции, термический распад нитросоединений, нитро-нитритная перегруппировка, нитрометан, фторнитрометан, дифторнитрометан, трифторнитрометан, хлорнитрометан, переходное состояние, неэмпирические квантово-химические методы, исследование путей реакций.

Резюме

При исследовании реакции нитро-нитритной перегруппировки (ННП) нитрометана и некоторых галоиднитрометанов полуэмпирическим (PM3) и неэмпирическими (HF, V3LYP, QCISD, CASSCF) квантово-химическими методами с использованием базисов 3-21G, 6-31G(d), 6-311++G(df,p) и различных уровней расчета (2×2, 4×4, 6×6, 8×8) для CASSCF сделан вывод о том, что она не является конкурентоспособным механизмом термического распада всех указанных нитросоединений, за исключением фторнитрометана, для которого энергия разрыва связи по данным метода V3LYP/6-31G(d) на 15 кДж/моль выше, чем барьер ННП.