

Тематическое направление: Строение и механизм мономолекулярного распада C-, N-, O-нитросоединений. Часть VII.
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПАДА ПЕРВИЧНЫХ N-НИТРОСОЕДИНЕНИЙ В ГАЗООБРАЗНОМ СОСТОЯНИИ.

© **Мазилов Елисей Александрович**¹, **Шамсутдинов Тимур Фаритович**²⁺,
Шамов Александр Георгиевич² и **Храпковский Григорий Михайлович**^{2+*}

¹ Казанский государственный университет.

² Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (8432) 194-220. E-mail: shamov@kstu.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: первичные нитраминаы, энергии диссоциации, геометрия, квантово-химический расчет.

Резюме

С использованием гибридных DFT-методов B3LYP/6-31G(d) и 6-311++(df,p), оптимизированы геометрические параметры, вычислены энтальпии образования и энергии диссоциации связи N-NO₂ для ряда первичных нитраминов.