

Полная исследовательская публикация *Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.*
Регистрационный код публикации: 7-11-1-14 *Подраздел: Квантовая химия.*
Предыдущее сообщение этой серии смотри в *Бутлеровских сообщениях*. 2007. Т.11. №1. С.6. (код 7-11-1-6)
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК: 541.124: 544.45: 547.332. Поступила в редакцию 5 сентября 2007 г.

Тематическое направление: Структура и механизм мономолекулярного распада C-, N-, O-нитросоединений. Часть XI.

Барьеры вращения нитрогрупп и предэкспоненциальный множитель реакций газофазного радикального распада нитроаренов.

© Козин Алексей Михайлович, Чачков Денис Владимирович⁺
и Храпковский Григорий Михайлович*

Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-42-20. E-mail: shamov@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитроарены, барьер вращения, предэкспоненциальный множитель, квантово-химический расчет.

Аннотация

В данной работе приведены результаты расчета барьеров вращения нитрогруппы в нитробензоле разными методами, а также барьеры вращения различных ароматических соединений рассчитанных методом B3LYP/6-31G(d). Здесь проведено исследование предэкспоненциального множителя реакции радикального распада и нитро-нитритной перегруппировки, а также установлена конкуренция этих двух механизмов первичного акта распада нитроаренов.