

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 7-11-1-6 Подраздел: Квантовая химия.
Предыдущее сообщение этой серии смотри в *Бутлеровских сообщениях*. 2005. Т.7. №4. С.11. (код 5-7-4-11)
Последующее сообщение этой серии смотри в *Бутлеровских сообщениях*. 2007. Т.11. №1. С.14. (код 7-11-1-14)
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: Строение и механизм мономолекулярного распада C-, N-, O-нитросоединений. Часть X.

Барьеры вращения нитрогрупп в нитроалканах.

© 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: shatov@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитроалканы, барьер вращения, квантово-химический расчет.

Аннотация

С использованием гибридных DFT-методов B3LYP/6-31G(d), 6-31G(d,p) и MP2/6-31G(d), 6-31G(d,p) определены барьеры вращения NO₂-группы для нитрометана и ряда его производных. Изучена закономерность влияния выбора метода расчета и базисных функций на результаты расчета на примере нитрометана.