

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 8-14-5-46 Подраздел: Квантовая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.144.2:662.237.5. Поступила в редакцию 20 ноября 2008 г.

Молекулярная структура нитробензола и ряда его монофункциональных производных в газообразном состоянии

© Шарипов Дмитрий Дамирович,^{1*+} Егоров Даниил Леонидович²
и Чачков Денис Владимирович²

¹ Кафедра общей химической технологии; ² Центр новых информационных технологий.
Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-89-41. E-mail: dsharist@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ароматические нитросоединения, молекулярная структура, квантово-химические расчеты.

Аннотация

С использованием гибридного метода функционала плотности B3LYP с различными базами определены геометрические параметры нитробензола, изомерных динитробензолов, нитротолуолов, нитроанилинов, нитрофенолов. Проанализировано влияние химического строения на изменение геометрических параметров реакционного центра молекул (C-NO₂) в ряду изученных соединений. Установлено, что донорные заместители: CH₃, NH₂, OH вызывают уменьшение длины связи C-NO₂ в *пара*-изомерах, а также в *орто*-нитроанилине и *орто*-нитрофеноле. Приведенные результаты можно объяснить проявлением прямого полярного сопряжения донорных заместителей с акцептором NO₂-группой. В *орто*-нитрофеноле и *орто*-нитроанилине важным дополнительным фактором является образование внутримолекулярных водородных связей. В динитробензолах величина r(C-NO₂) незначительно увеличивается. На основе указанных выше факторов можно объяснить и изменение других геометрических параметров реакционного центра.