

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 8-14-5-52 Подраздел: Квантовая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.332.2:544.144.7:662.237.5. Поступила в редакцию 20 ноября 2008 г.

Энтальпии образования и энергии диссоциации связи C-NO₂ в ряду производных нитробензола

© 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, энтальпия образования, энергия диссоциации, квантово-химический расчет

Аннотация

С использованием различных базисов гибридного метода функционала плотности B3LYP рассчитаны энтальпии образования и энергии диссоциации связи C-NO₂ (D(C-N)) нитробензола, изомерных динитробензолов, нитротолуолов, нитроанилинов и нитрофенолов. Проанализированы основные особенности влияния молекулярной структуры на изменение энтальпий образования. Для *o*-нитрофенола и *o*-нитроанилина отмечено влияние внутримолекулярной водородной связи. Расчетные значения D(C-N) использованы для обсуждения влияния молекулярной структуры на изменения в ряду перечисленных соединений энергии активации радикального газофазного распада.