

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Квантово-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/15-44-12-150 Подраздел: Физическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.122.2: 544.163.2: 544.18: 544.43. Поступила в редакцию 21 ноября 2015 г.

Тематическое направление: Теоретическое исследование механизма изомеризации ароматических нитрозооксидов. Часть 2.

Корреляционный анализ экспериментальных констант скорости реакций арилнитрозооксидов и глобальных индексов реакционной способности

© Панкратьев Евгений Юрьевич

Уфимский государственный университет экономики и сервиса. Ул. Чернышевского, д.145. г. Уфа, 450078. Республика Башкортостан. Россия. E-mail: evgeniy@pankratyev.com

Ключевые слова: нитрозооксиды, термическая гибель, *транс-цис*-изомеризация, *орто*-циклизация, индексы реакционной способности, DFT-расчёты.

Аннотация

Изучены корреляционные зависимости глобальных индексов реакционной способности и экспериментальных констант гибели *транс*- и *цис*-изомеров *пара*-замещённых фенилнитрозооксидов. На основе характеристичных зарядов атомов нитрозооксидной группы произведен анализ вклада резонансных форм в общую электронную структуру молекул арилнитрозооксидов и природы их влияния на процессы гибели изомерных форм арилнитрозооксидов. Исследовано влияние сольватации на резонансные формы фенилнитрозооксидов.