

Тематическое направление: Строение и механизм мономолекулярного распада С-, N-, O-нитросоединений. Часть V.
**НИТРОЭФИРЫ МОНОАТОМНЫХ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ, НЕКОТОРЫЕ
ФТОР- И ХЛОПРОИЗВОДНЫЕ МЕТИЛНИТРАТА.**

© Шамсутдинов Тимур Фаритович,⁺ Чачков Денис Владимирович,

Шамов Александр Георгиевич и Храпковский Григорий Михайлович*

Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Татарстан. Россия. Тел.: (8432) 194-220. E-mail: shamov@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитроэфиры, галогенпроизводные метилнитрата, энтальпии образования, энергия диссоциации, элиминирование, переходное состояние, энергия активации, неэмпирический расчет.

Резюме

Методом функционала плотности ВЗLYP определены равновесные геометрические параметры, энтальпии образования соединений и радикалов, энергии диссоциации связи O-NO₂ нитроэфиров моноатомных алифатических спиртов, а также фтор- и хлорпроизводных метилнитрата. Проанализированы основные тенденции изменения параметров геометрической и электронной структуры молекул, энтальпий образования и энергий диссоциации. Проведено изучение различных механизмов первичного акта газофазного распада нитроэфиров моноатомных алифатических спиртов, фтор- и хлорпроизводных метилнитрата.