

Тематическое направление: Строение и механизм мономолекулярного распада C-, N-, O-нитросоединений. Часть VI.

НИТРОЭФИРЫ ПОЛИАТОМНЫХ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ.

© Шамсутдинов Тимур Фаритович,⁺ Шамсутдинов Артур 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, энтальпия образования, энергия диссоциации, энергия активации, неэмпирический расчет.

Резюме

Рассмотрены основные тенденции изменения геометрических параметров молекул, распределения электронной плотности, энтальпий образования и энергий диссоциации. Проведено изучение радикального механизма первичного акта газофазного распада нитроэфиров алифатических спиртов. Проанализировано влияние строения молекул на энергию активации газофазного мономолекулярного распада нитроэфиров алифатических спиртов.