

Тематическое направление: Химия изоцианатов. Часть I.

## ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ 2,4-ТОЛУИЛЕНДИИЗОЦИАНАТА

© **Самуилов Александр Яковлевич**,<sup>+</sup> **Зенитова Любовь Андреевна**\* и **Самуилов Яков Дмитриевич**

*Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский государственный технологический университет.*

*Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. E-mail: samuil@mi.ru*

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** 2,4-толуилендиизоцианат, квантово-химический расчет.

### Резюме

Квантово-химическим методом V3LYP в базе STO 6-31G(d) рассчитана геометрия и электронная структура 2,4-толуилендиизоцианата. С позиций стерических и кулоновских взаимодействий проведен анализ различной реакционной способности изоцианатных групп в рассматриваемом соединении в реакциях со спиртами.