

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОНКУРЕНЦИИ РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМОВ ГАЗОФАЗНОГО РАСПАДА ПЕРВИЧНЫХ N-НИТРАМИНОВ

© Мазилев Елисей Александрович,¹ Кондратьева Екатерина Игоревна,²
Шамов Александр Георгиевич³ и Храпковский Григорий Михайлович^{3*+}

¹Кафедра физической химии. Казанский государственный университет.

Ул. Кремлевская 29. г. Казань 420008. Республика Татарстан. Россия.

²Кафедра аналитической химии, сертификации и менеджмента качества;

³Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Республика Татарстан. Россия. ²Тел.: (843) 231-43-67.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: нитрамины, мономолекулярный распад, квантово-химический расчет, нитро-нитритная перегруппировка, элиминирование азотистой кислоты, образование аци-формы.

Резюме

В работе на основе результатов квантово-химических исследований рассматриваются различные механизмы газофазного мономолекулярного распада первичных нитраминов, приводятся энтальпии активации реакций радикального распада, элиминирование азотистой кислоты, нитро-нитритной перегруппировки и образования аци-формы.