

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 66.094.3-926.214 + 54.057. Поступила в редакцию 12 декабря 2014 г.

Квантово-химическое исследование протонирования озона

© Нго Куен Куи, Самуилов* Александр Яковлевич, Самуилов Яков Дмитриевич,
Валиуллин Фанис Фаритович, Григорьев⁺ Евгений Иванович
и Петухов Александр Александрович

*Кафедра технологии синтетического каучука. Казанский государственный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-42-14. E-mail: grigoriev@kstu.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: озон, квантовая химия, ВЗЛР, протонирование, DFT.

Аннотация

Квантово-химическим методом ВЗЛР/6-311++G(df,p) исследован процесс протонирования озона в синглетном и триплетном состояниях. Изучены геометрическое строение продуктов протонирования. Описаны термодинамические параметры реакции протонирования озона в синглетной и триплетной электронных конфигурациях. Показано, что процесс протонирования озона во всех случаях является экзотермическим и протекает с понижением свободной энергии и уменьшением энтропии.