**КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ОРТО-ЗАМЕЩЕННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ НИТРОЗООКСИДОВ**

***А.Р. Юсупова1, Л.В. Еникеева2, С.Л. Хурсан1***

*1Уфимский институт химии РАН*

***2ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»***

Ароматические нирозооксиды являются высокореакционноспособными интермедиатами фотоокисления азидов [1,2]. Данные частицы обладают уникальными свойствами благодаря наличию у них *цис-транс*-изомерии из-за полуторного порядка связи N–O в нитрозооксидном фрагменте (рис.1).



Рис.2. Конформационные формы нитрозооксидов

В результате в пределах экспериментальной ошибки были воспроизведены эффективные константы скоростей расходования всех изомеров **2a** и **2b** (табл. 1) и определены константы скоростей элементарных стадий.

Таблица 1. Результаты расчета эффективных констант скорости гибели (*k*eff, с‑1) конформеров нитрозооксидов **2a** и **2b** при решении ОКЗ.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Изомер | ОКЗ | Эксперимент |
|  | **a** |  |
| **2-1** | 1.59 | 1.63 |
| **2-2** | 3.1×103 | 3.1×103 |
| **2-3** | 0.14 | 0.14 |
| **2-4** | 0.76 | 0.77 |

Литература

1. Gritsan N. P. Study of photochemical transformations of organic azides by matrix isolation techniques and quantum chemistry // Russian Chemical Reviews. 2007. ‒ V. 76, № 12. ‒ P. 1139-1160.

2. Chainikova E. M., Khursan S.L., Safiullin R.L. «The chemistry of nitroso oxides» In The Chemistry of Peroxides; Greer A. and Liebman J. F., Ed.; John Wiley & Sons, Ltd.: Chichester, UK, 2014; Vol. 3, pp 357–420.