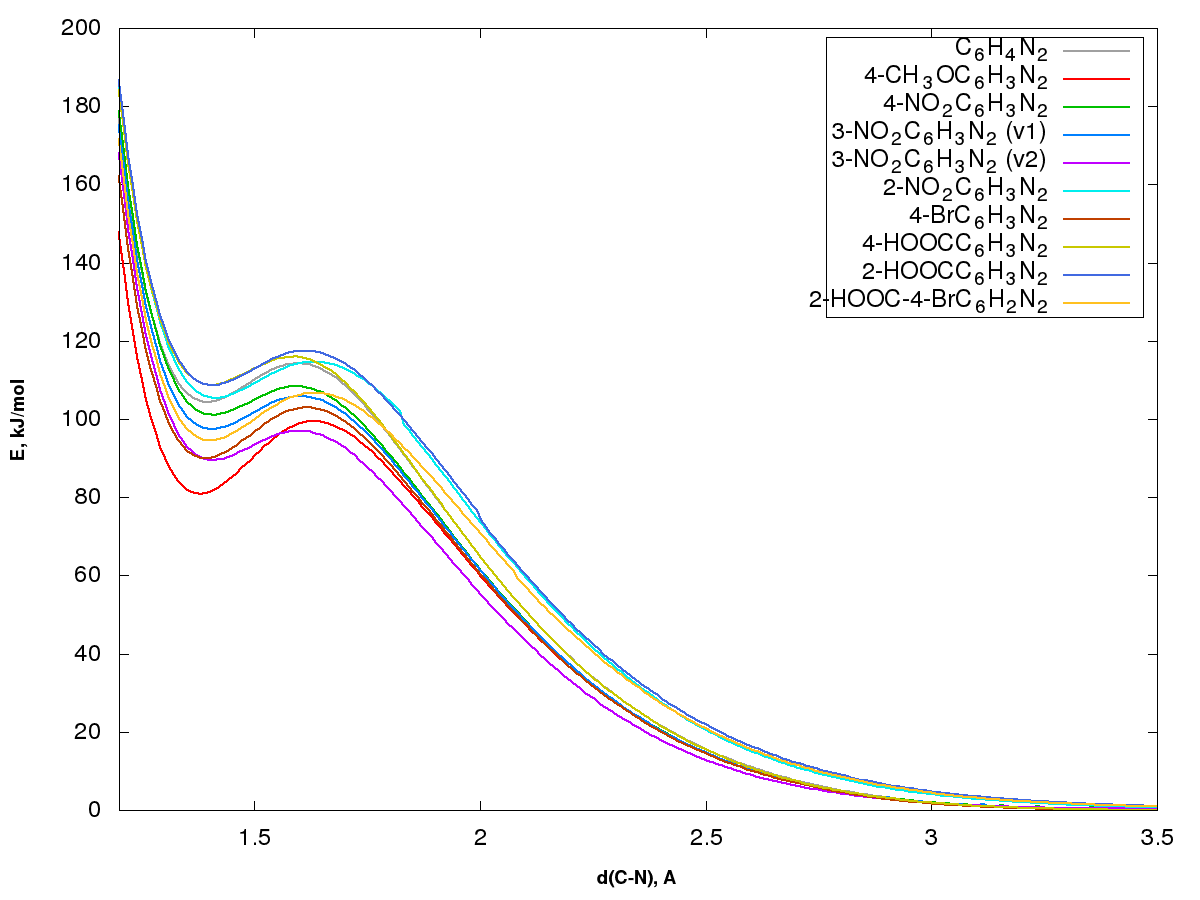
**Исследование процессов распада интермедиатов (I)**



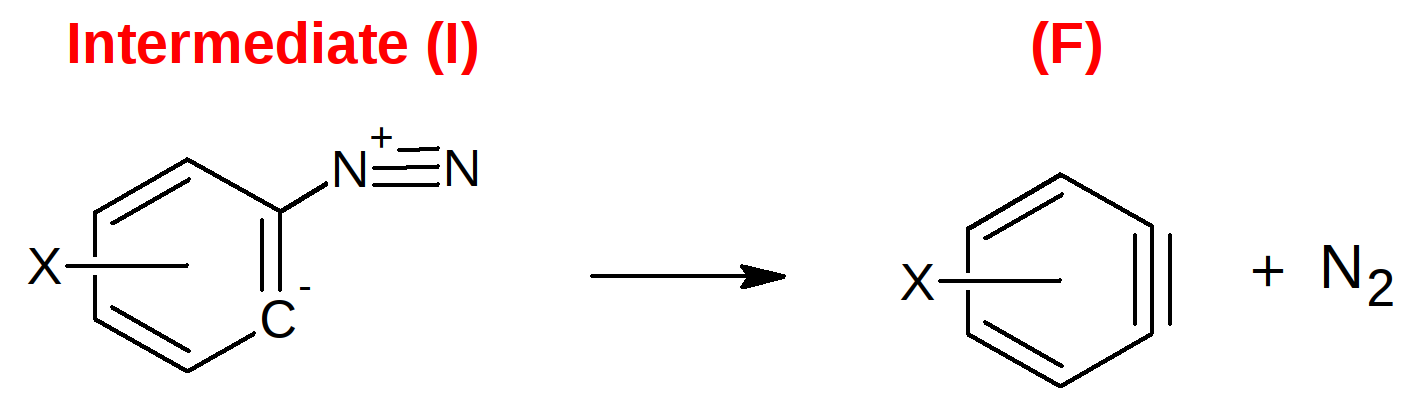


Рис. 1. Зависимость энергии интермедиатов (I) при увеличении дины связи C-N в

процессе отщепления азота с образованием производных бензина (F),

рассчитанная методом DFT Restricted B3LYP в базисе aug‑cc‑pVDZ

Таблица 1.

Результаты сканирование ППЭ отщепления азота от интермедиатов (I) с образованием бензин-производных (F) при увеличении длины связы C-N, (DFT R-B3LYP aug-cc-pVDZ),

энергии приведены относительно соответствующих бензин производных.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **№** | **Process** | **E0****, kJ/mol и (dC-N, Å)** | | **EA, kJ/mol** | **Наблюдаемые процессы в MS-ESI**  **эксперименте** |
| **интермедиата** | **переходного состояния** |
| **1a** | C6H4N2 = C6H4 + N2 |  |  |  |  |
| **1e** | 4-MeO-C6H3N2 = 4-MeO-C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1d, 2, 3** | 4-NO2C6H3N2 = 4-NO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1c (v1)** | 3-NO2C6H3N2 = 3-NO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1c (v2)** | 3-NO2C6H3N2 = 3-NO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1b** | 2-NO2C6H3N2 = 2-NO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1h** | 4-BrC6H3N2 = 4-BrC6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1g** | 4-HCO2C6H3N2 = 4-HCO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1f** | 2-HCO2C6H3N2 = 2-HCO2C6H3 + N2 |  |  |  |  |
| **1i** | 2-HCO2-4-BrC6H2N2 =  2-HCO2-4-BrC6H2 + N2 |  |  |  |  |