

Е. В. Николаева, И. В. Аристов, Д. В. Чачков,
М. Е. Колпаков, Г. М. Храпковский

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ МЕХАНИЗМОВ ПЕРВИЧНЫХ РЕАКЦИЙ ГАЗОФАЗНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ N-МЕТИЛ-N'-МЕТОКСИДИАЗЕН-N-ОКСИДА. ЧАСТЬ 2. СТРОЕНИЕ N-МЕТИЛ-N'-МЕТОКСИДИАЗЕН-N-ОКСИДА И РЕАКЦИИ ВРАЩЕНИЯ МЕТИЛЬНЫХ ГРУПП*

Ключевые слова: квантово-химический расчет, N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксид, структура, Z- и E-конформеры, вращение метильных групп, переходные состояния.

С использованием методов функционала плотности PBE, B3LYP, wB97XD, wB97X с различными наборами базисных функций, а также композитного метода G4, изучены реакции вращения метильных групп при атомах азота и кислорода в двух Z-конформерах, отличающихся поворотом группы CH₃O относительно плоскости молекулы, и E-конформере простейшего представителя алкокси-NNO-азоксисоединения – N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксида. Подтверждено, что в структурах, отвечающих минимумам на поверхности потенциальной энергии, атомы водорода групп CH₃ имеют «шахматное» расположение, что согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Доказано, что для наиболее энергетически выгодной Z-конформации N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксида, где фрагмент молекулы C-(O)N=N-O-C плоский, а атомы кислорода при двойной связи N=N находятся в цис-положении, имеется только одна структура, отвечающая минимуму энергии, – с углом поворота метильной группы при атоме азота ($H^7C^1N^2N^3$) равном 0°. Показано, что в переходных состояниях вращения метильных групп во всех трех конформерах N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксида атомы водорода образуют «заслоненные» структуры. Оценены барьеры активации обсуждаемых реакций. Установлено, что в Z-конформере вращение групп CH₃, находящихся как при атоме азота, так и при атоме кислорода, является свободным. Рассчитанные для этих реакций значения энтальпии активации лежат в пределах ошибки эксперимента – 3-4 кДж/моль. Для E- и Z'-конформеров N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксида барьеры вращения обеих метильных групп несколько выше (лежат в пределах 19-25 кДж/моль по данным разных методов), но эти реакции также протекают практически свободно. При увеличении температуры наблюдается снижение энтальпии активации обсуждаемых реакций. Отмечено, что данные всех используемых в работе методов хорошо согласуются между собой. Статья посвящается памяти Шамова Александра Георгиевича.

Е. V. Nikolaeva, I. V. Aristov, D. V. Chachkov,
M. E. Kolpakov, G. M. Khrapkovskii

A THEORETICAL STUDY OF ALTERNATIVE PRIMARY REACTIONS MECHANISMS OF GAS-PHASE THERMAL DECOMPOSITION OF THE N-METHYL-N'-METHOXYDIAZENE-N-OXIDE. PART 2. N-METHYL-N'-METHOXYDIAZENE-N-OXIDE STRUCTURE AND ROTATION REACTIONS OF ITS FUNCTIONAL GROUPS AND METHYL GROUP ROTATION REACTIONS*

Keywords: quantum chemical calculation, N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide, structure, Z- and E-conformers, rotation of methyl groups, transition states.

Using the density functional methods PBE, B3LYP, wB97XD, wB97X with different sets of basis functions, as well as the composite G4 method, the rotation reactions of methyl groups at nitrogen and oxygen atoms in two Z-conformers, differing in the rotation of the CH₃O group relative to the plane of the molecule, and the E-conformer of the simplest representative of an alkoxy-NNO-azoxy compound – N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide were studied. It has been confirmed that in the structures corresponding to the minima on the potential energy surface, the hydrogen atoms of the CH₃ groups have a “checkerboard” arrangement, which is consistent with the available experimental data. It has been proven that for the most energetically favorable Z-conformation of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide, where the fragment of the molecule C-(O)N=N-O-C is planar, and the oxygen atoms at the double bond N=N are in the cis-position, there is only one structure corresponding to the minimum energy – with the rotation angle of the methyl group at the nitrogen atom ($H^7C^1N^2N^3$) equal to 0°. It is shown that in the transition states of rotation of methyl groups in all three conformers of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide, hydrogen atoms form “eclipsed” structures. The activation barriers of the reactions under discussion were estimated. It was found that in the Z-conformer the rotation of the CH₃ groups located both at the nitrogen atom and at the oxygen atom is free. The values of activation enthalpies calculated for these reactions are within the experimental error – 3-4 kJ/mol. For the E- and Z'-conformers of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide, the rotation barriers of both methyl groups are somewhat higher (they are within 19-25 kJ/mol according to data from different methods), but these reactions also proceed practically freely. With increasing temperature, a decrease in the activation enthalpy of the reactions under discussion is observed. It is noted that the data from all methods used in the work are in good agreement with each other. The article is dedicated to the memory of Shamov Alexander Georgievich.

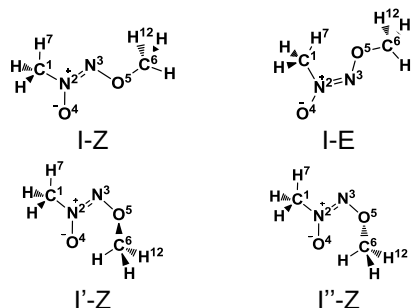
N-метил-N'-метоксидиазен-N-оксид (I) – изомер
диметилнитрамина (CH₃)₂N-NO₂ – простейший

представитель очень важного в практическом отношении
класса веществ – алкокси-NNO-

азоксисоединений (АЗС) [1-4], которые находят широкое применение в медицине и фармацевтике, атмосферной, биологической и аналитической химии, в топливной промышленности, производстве взрывчатых веществ, машиностроении и других областях [5-17]. Понятно, что подобная востребованность АЗС требует всестороннего изучения их свойств и различных механизмов превращений, в том числе и механизмов термического разложения. Однако, если изучению свойств алкокси-NNO-азоксисоединений, синтезу и различного рода взаимодействия с другими классами веществ посвящено немало работ [2-4,18-40], то исследований, касающихся механизма его термодеструкции, включая структуру, не так много. В ряде случаев они не позволяют делать однозначные выводы. Как известно, хорошими независимыми оценками могут в данном случае выступать результаты квантово-химических расчетов [41-49].

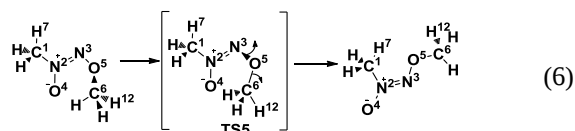
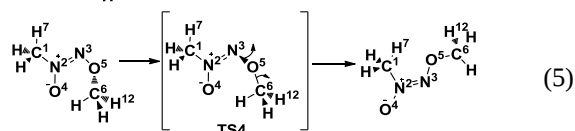
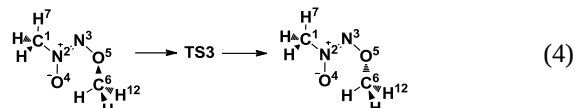
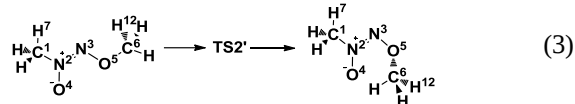
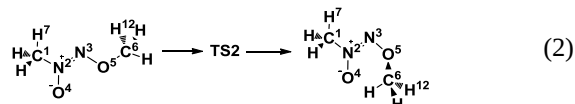
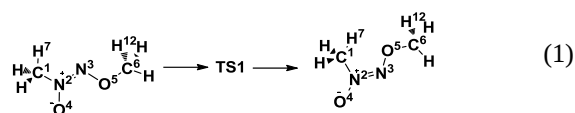
Любое теоретическое исследование механизмов химических реакций всегда легче и эффективнее начинать с простейших представителей рядов соединений. Так можно довольно быстро получить геометрические параметры реакционного центра изучаемых процессов, который, как правило, мало изменяется при введении заместителей [44]. Подобный прием сильно упрощает работу и значительно экономит время. В этом плане N-метил-N'-метоксидазен-N-оксид идеально подходит в качестве модели для дальнейшего изучения механизмов термического распада замещенных АЗС. При этом он еще является перспективным компонентом энергетических материалов, так как обладает большей инертностью к химическим реагентам, таким как кислоты, основания, окислители и восстановители, по сравнению с нитраминами [3,23,24], впрочем, как и все простейшие представители алкокси-NNO-азоксисоединений.

В предыдущей нашей работе [49] было исследовано четыре возможные конформации N-метил-N'-метоксидазен-N-оксид:



Было подтверждено, что наиболее энергетически выгодной конфигурацией соединения I является его Z-конформация, в которой фрагмент молекулы C-(O)N=N-O-C является плоским, а атомы O при двойной связи N=N находятся в *цис*-положении. Конформации I-E (E-конформация), I'-Z и I''-Z имеют энтальпии образования примерно на 17-18 кДж/моль по результатам различных квантово-химических методов выше, что неплохо согласуется с результатами других исследователей [4,20,24].

Кроме расчета геометрических параметров указанных выше структур в работе [49] были исследованы реакции конформационных переходов между ними:



Для этих реакций были найдены структуры переходных состояний и рассчитаны барьеры реакций. На основании сравнения полученных значений энтальпий активации с экспериментально определенным в работе [3] был сделан вывод, что все указанные выше процессы, за исключением реакции (5), могут реализовываться в ходе термического распада N-метил-N'-метоксидазен-N-оксида. Дополнительным аргументом в пользу этого вывода является доказанная нами возможность реализации вращения вокруг двойной связи функциональных групп в *аци*-формах ароматических нитросоединений [45-47].

Однако указанный вывод противоречит выводам, сделанным в работах [3,4]. Возможной причиной этого является то, что полученное в работе [4] переходное состояние относится не к процессу (1), как утверждают авторы работы [4], а к конформационному переходу (5). На эту мысль нас натолкнуло то, что описываемый Зюзиным И.Н. и его соавторами одностадийный процесс начинался с поворота группы OCH₃ вокруг связи NO, а лишь затем осуществлялся поворот группы NOCH₃ вокруг двойной связи N=N, а также близость полученного ими значения энтальпии активации к барьеру конформационного перехода (5) [49].

Казалось бы, в вопросе о геометрической структуре N-метил-N'-метоксидазен-N-оксида можно ставить точку, однако по причине небольшого объема статьи [49] в ней был упущен один момент, а именно вопрос о вращении метильных групп. Тем не менее, даже в этом, казалось бы, незначительном моменте, есть неопределенность.

Дело в том, что в работе [20], где помимо исследования фотоэлектронного спектра соединения I авторы выполнили квантово-химический расчет его структуры методом Хартри-Фока с набором базисных функций STO-3G и 4-31G, было установлено, что существует два Z-конформера, отличающихся

поворотом группы CH_3 при атоме азота (угол $\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$ примерно равен 0° и 60° соответственно). При этом изомер, в котором угол поворота группы CH_3 при N^2 ($\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$) равен 0° стабильнее на 6.9 кДж/моль, чем структура с углом поворота $\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$ равном примерно 60° .

Надо отметить, что в работе [21], где была исследована структура соединения I методом электронной дифракции в газовой фазе, указано, что атомы водорода в конформере I-Z располагаются в «шахматном» порядке.

Учитывая важность оценки барьеров вращения функциональных групп для правильной интерпретации экспериментальных данных по колебательным спектрам изучаемых соединений, в настоящей работе мы постарались поставить точку в вопросе всестороннего исследования структуры N-метил-N'-метоксидазена-N-оксида, изучив вращение групп CH_3 как при атоме N, так и при атоме O в трех указанных выше конформерах I-Z, I-E и I'-Z. Четвертый конформер – I''-Z – является зеркальным изомером структуры I'-Z, поэтому результаты для них являются идентичными [49].

Первоначально расчеты геометрических параметров структур минимумов и переходных состояний выполнялись методом функционала плотности (DFT) PBE/L11 в пакете прикладных программ Priroda [50] с использованием для автоматизации итерационного алгоритма расчета поверхности потенциальной энергии оболочки P-AUTOEXTREMUM [51]. Найденные структуры брались в качестве стартовых геометрий для вычислений на более высоких уровнях теории – на уровнях DFT методов: B3LYP/6-31G(2df,p) [52-55], wB97XD/6-31G(2df,p) [54-56], wB97XD/Def2TZVP [56,57] и wB97X/Def2TZVP [56-57], а также композитного метода G4 [58], с использованием пакета прикладных программ Gaussian 16 [59].

Для предварительного исследования реакций вращения метильных групп использовалась методика «мягкого» сканирования [43,48,50,59], а затем геометрии в токах максимумов кривых зависимостей энергий от значения двугранного угла, отвечающего за вращение (HCNN или HCON в зависимости от положения группы CH_3), брались в качестве стартовых для прямого поиска переходного состояния [50,59].

В независимости от используемого пакета прикладных программ все найденные критические точки на поверхности потенциальной энергии характеризовались как минимумы или переходные состояния соответственно по отсутствию или наличию отрицательных собственных значений матрицы Гессе [50,59]. Соответствие найденных переходных состояний исследуемым процессам устанавливалось посредством спусков по пути реакции из полученных седловых точек к реагентам и продуктам, и последующей оптимизацией геометрии конечных структур спусков [48,59]. Расчет проводился для синглетной поверхности. Все решения проверялись на стабильность к накладываемым на волновую функцию возмущениям [48,59].

Расчет выполнялся для газовой фазы.

Оценка аррениусовских параметров реакций вращения метильных групп в N-метил-N'-метоксидазена-N-оксиде выполнялась при нормальных условиях, а также при 573 К – средней температуре эксперимента, описанного в работе [3].

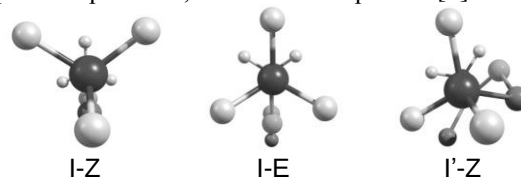


Рис. 1 – Расположение атомов водорода в конформерах I-Z, I-E и I'-Z (минимумы на поверхности потенциальной энергии).

Fig. 1 – Location of hydrogen atoms in conformers I-Z, I-E and I'-Z (minima on the potential energy surface).

Таблица 1 - Геометрические параметры (длины связи в пм, углы в градусах) метильных групп и их расположения относительно других атомов в конформерах N-метил-N'-метоксидазена-N-оксида

Table 1 - Geometrical parameters (bond lengths in pm, angles in degrees) of methyl groups and their locations relative to other atoms in conformers of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide

Метод	Структура	N^2C^1	O^5C^6	H^7C^1	H^{12}C^6	$\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2$	$\text{H}^{12}\text{C}^6\text{O}^5$	$\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^3$	$\text{H}^{12}\text{C}^6\text{O}^5\text{N}^3$
PBE/L11	I-Z	148.6	143.0	109.4	110.1	109.7	111.5	0.0	61.3
	I-E	149.9	143.0	109.7	109.7	109.3	105.2	-59.6	180.0
	I'-Z	149.1	144.3	109.4	109.9	109.2	111.8	3.1	69.6
B3LYP/6-31G(2df,p)	I-Z	147.7	142.4	108.8	109.5	109.7	111.2	0.0	61.1
	I-E	148.9	142.3	109.0	109.1	109.2	105.4	-59.5	180.0
	I'-Z	148.1	143.3	108.8	109.3	109.3	111.3	0.0	68.0
wB97X/Def2TZVP	I-Z	146.9	142.1	108.6	109.2	109.5	110.8	0.0	61.1
	I-E	147.9	142.0	108.7	108.8	109.1	105.5	-59.6	180.0
	I'-Z	147.2	142.6	108.5	109.1	109.2	111.2	0.9	67.1
wB97XD/6-31G(2df,p)	I-Z	147.0	141.6	108.8	109.5	109.6	111.1	0.0	61.1
	I-E	148.1	141.5	109.0	109.1	109.2	105.5	-59.5	180.0
	I'-Z	147.2	142.3	108.7	109.4	109.3	111.3	1.4	67.5
wB97XD/Def2TZVP	I-Z	146.9	141.8	108.5	109.2	109.6	110.9	0.0	61.2
	I-E	147.9	141.7	108.7	108.8	109.2	105.4	-59.5	180.0
	I'-Z	147.2	142.4	108.5	109.1	109.3	111.4	0.8	67.4

На рис. 1 приведены структуры I-Z, I-E и I'-Z, соответствующие минимумам на поверхности потенциальной энергии. Как показывает этот рисунок, во всех трех конформерах расположение атомов водорода соответствует «шахматному» порядку, как это и было отмечено в работе [21]. В табл. 1 приведены геометрические параметры представленных на рис. 1 структур с акцентом на метильные фрагменты. Другие геометрические параметры можно подробно посмотреть в статье [21].

На рис. 2 представлены структуры переходных состояний, лежащих на пути реакций вращения метильных групп, находящихся при атомах N и O в соответствующих конформерах. В табл. 2 приводятся их геометрические параметры. Также в табл. 2 и табл. 3 показаны энтальпии активации ($\Delta H^\ddagger$) процессов враще-

ния групп CH_3 при атомах азота и кислорода соответственно.

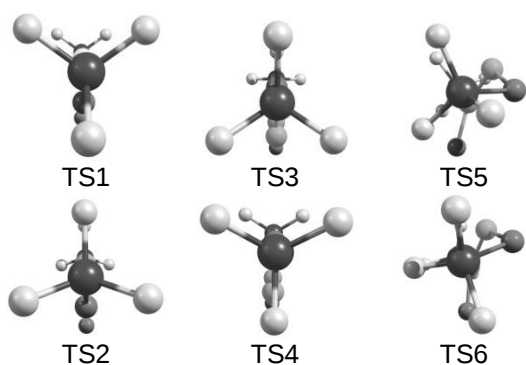


Рис. 2 – Расположение атомов водородов в переходных состояниях вращения (седловые точки на поверхности потенциальной энергии) группы CH_3 в конформерах I-Z, I-E и I'-Z соответственно: при атоме N – TS1, TS3, TS5; при атоме O – TS2, TS4, TS6

Fig. 2 – Location of hydrogen atoms in transition states of rotation (saddle points on the potential energy surface) of the CH_3 group in conformers I-Z, I-E and I'-Z, respectively: at the N atom - TS1, TS3, TS5; at the O atom - TS2, TS4, TS6

Как показывает рис. 2 во всех переходных состояниях обсуждаемых процессов расположение атомов водорода соответствует «заслоненным» структурам.

Анализируя результаты, представленные в табл. 1-3 можно отметить, что данные всех используемых нами методов хорошо согласуются между собой: для геометрических параметров значения лежат в пределах 2-3 пм для длин связей и 1-5° для углов, для энтальпий активации – в пределах 1-3 кДж/моль.

Надо отметить, что всеми использованными нами методами была найдена только одна конфигурация I-Z, соответствующая минимуму, а именно с углом поворота группы CH_3 при атоме азота ($\angle \text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$) равном 0°. Структура с углом поворота группы CH_3 при атоме азота ($\angle \text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$) равным примерно 60° соответствует переходному состоянию ее вращения (TS1), что противоречит выводу, сделанному в работе [20]. Вероятно, полученные авторами статьи [20] данные являются ошибочными из-за неточностью используемых ими методов.

Вращение обеих метильных групп CH_3 , расположенных как при атоме азота, так и при атоме кислорода в конформере I-Z, является свободным. Эти реакции практически не имеют барьеров. Значения их энтальпий активации для данного соединения лежат в пределах ошибки эксперимента (табл. 2 и 3). Несколько выше барьеры вращения метильных групп для двух других конформеров, но они также проходят практически свободно. При увеличении температуры происходит снижение энтальпий активации обсуждаемых реакций.

Таблица 2 - Геометрические параметры (длины связи в пм, углы в градусах) переходных состояний и энтальпии активации ($\Delta H^\ddagger$, кДж/Моль) вращения метильных групп в конформерах N-метил-N'-метоксидазена-N-оксида

Table 2 - Geometrical parameters (bond lengths in pm, angles in degrees) of transition states and activation enthalpies ($\Delta H^\ddagger$, kJ/Mol) of methyl group rotation in conformers of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide

Метод	Структура	H^7C^1	H^{12}C^6	$\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2$	$\text{H}^{12}\text{C}^6\text{O}^5$	$\text{H}^7\text{C}^1\text{N}^2\text{N}^3$	$\text{H}^{12}\text{C}^6\text{O}^5\text{N}^3$	$\Delta H^\ddagger$	
								298	573
PBE/L11	TS1	109.6	110.1	109.5	111.6	-60.4	61.3	4.2	-
	TS2	109.5	109.8	109.7	110.7	0.0	0.0	3.3	-
	TS3	109.2	109.7	111.4	105.1	0.0	180.0	19.2	-
	TS4	109.7	110.0	109.3	109.0	-59.6	-120.1	20.7	-
	TS5	109.5	110.0	109.4	111.8	-57.7	69.4	22.7	-
	TS6	109.4	109.6	109.2	112.5	3.8	12.3	24.6	-
B3LYP/6-31G(2df,p)	TS1	109.0	109.5	109.4	111.2	-60.2	61.1	4.4	2.3
	TS2	108.8	109.2	109.7	110.6	0.0	0.0	3.1	0.9
	TS3	108.4	109.1	111.7	105.3	0.0	180.0	20.8	18.9
	TS4	109.0	109.4	109.2	108.8	-59.5	-120.3	21.9	20.1
	TS5	108.9	109.4	109.1	111.3	-58.8	67.9	21.7	19.6
	TS6	108.8	109.0	109.3	111.8	2.6	11.9	22.6	20.5
wB97X/Def2TZVP	TS1	108.7	109.2	109.1	110.8	-60.2	61.1	4.5	2.2
	TS2	108.6	108.9	109.6	110.4	0.0	0.0	3.4	1.2
	TS3	108.2	108.8	111.9	105.4	0.0	180.0	23.7	21.7
	TS4	108.8	109.1	109.1	108.6	-59.7	-120.2	25.0	23.1
	TS5	108.7	109.1	108.9	111.2	-59.3	66.9	22.8	20.6
	TS6	108.5	108.9	109.2	111.7	1.8	13.4	22.5	20.3
wB97XD/6-31G(2df,p)	TS1	108.9	109.5	109.3	111.1	-60.2	61.1	4.3	2.2
	TS2	108.8	109.2	109.6	110.6	0.0	0.0	3.2	1.0
	TS3	108.4	109.1	111.8	105.5	0.0	180.0	21.7	19.9
	TS4	109.0	109.4	109.2	108.8	-59.7	-120.2	22.6	20.7
	TS5	108.9	109.4	109.0	111.3	-58.8	67.3	19.6	17.5
	TS6	108.8	109.1	109.2	111.9	2.5	12.9	20.1	17.9
wB97XD/Def2TZVP	TS1	108.7	109.2	109.2	110.9	-60.2	61.2	4.4	2.3
	TS2	108.5	108.9	109.6	110.5	0.0	0.0	3.2	1.0
	TS3	108.2	108.8	111.9	105.4	0.1	180.0	23.0	21.2
	TS4	108.7	109.1	109.2	108.6	-59.7	-120.2	24.5	22.6
	TS5	108.6	109.2	109.0	111.4	-59.5	67.2	23.1	21.0
	TS6	108.5	108.8	109.3	111.8	1.8	13.5	22.9	20.8

Таблица 3 - Геометрические параметры (длины связи в пм, углы в градусах) переходных состояний и энтальпии активации ($\Delta H^\ddagger$, кДж/Моль) вращения метильных групп в конформерах N-метил-N'-метоксидазена-N-оксида, полученные комбинированным методом G4

Table 3 - Geometrical parameters (bond lengths in pm, angles in degrees) of transition states and enthalpies of activation ($\Delta H^\ddagger$, kJ/Mol) of methyl group rotation in conformers of N-methyl-N'-methoxydiazene-N-oxide obtained by the composite G4 method

Структура		TS1	TS2	TS3	TS4	TS5	TS6
$\Delta H^\ddagger$	298	4.2	4.0	22.5	20.6	21.4	20.9
	573	2.0	1.8	24.0	22.1	19.4	18.8

*Вклад Чачкова Д.В. финансируется в рамках гос. задания НИЦ «Курчатовский институт» (FNEF-2024-0016).

*Памяти Шамова Александра Георгиевича посвящается.

Литература

1. W. Traube, *Ann Chemie (Paris)*, **300**, 81-128 (1898).
2. Е.П. Кирпичев, И.Н. Зюзин, В.В. Авдонин, Ю.И. Рубцов, Д.Б. Лемперт, *Журн. физ. химии*, **80** (9), 1543-1546 (2006) [E.P. Kirpichev, I.N. Zyuzin, V.V. Avdonin, Yu.I. Rubtsov, D.B. Lempert, *Rus. J. Phys. Chem. A (Engl. Transl.)*, **80** (9), 1359-1362 (2006). DOI: 10.1134/S0036024406090019].
3. И.Н. Зюзин, Д.Б. Лемперт, Г.Н. Ничипоренко, *Изв. АН СССР Сер. хим.*, **37** (7), 1506-1509 (1988) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, G.N. Nechiporenko, *Bull. Acad. Sci. USSR. Div. Chem. Sci. (Engl. Transl.)*, **37** (7), 1329-1332 (1988). DOI: 10.1007/BF00962732].
4. В.Е. Крисыук, Т.В. Сырко, И.Н. Зюзин, *J. Phys. Org. Chem.*, **35**, e4407 (2022). DOI: 10.1002/poc.4407.
5. P.J. Crutzen, *Ann. Rev. Earth Planet. Sci.*, **7**, 443-472 (1979). DOI: 10.1146/annurev.earth.07.050179.002303.
6. P.G. Wang, M. Xian, X. Tang, X. Wu, Z. Wen, T. Cai, A. J. Janczuk, *Chem. Rev.*, **102**, 1091-1134 (2002). DOI: 10.1021/cr000040l.
7. J.A. Hrabie, L.K. Keefer, *Chem. Rev.*, **102**, 1135-1154 (2002). DOI: 10.1021/cr000028t.
8. T.B. Cai, X. Tang, J. Nagorski, P.G. Brauschweiger, P.G. Wang, *Bioorg. Med. Chem.*, **11**, 4971-4975 (2003). DOI: 10.1016/j.bmc.2003.09.003.
9. J. Brand, T. Huhn, U. Groth, J.C. Jochims, *Chem. Eur. J.*, **12**, 499-509 (2006). DOI: 10.1002/chem.200500325.
10. P.G. Wang, T.B. Cai, N. Taniguchi (eds.), *Nitric oxide donors: for pharmaceutical and biological applications*, Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005, 368 p.
11. T.-C. Li, L. Yang, Z.-M. Li, T.-L. Zhang, *Chin. J. Energ. Mat.*, **20** (3), 371-379 (2012). DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.03.023.
12. O.V. Anikin, N.E. Leonov, M.S. Klenov, A.M. Churakov, A.A. Voronin, A.A. Guskov, N.V. Muravyev, Y.A. Strelenko, I.V. Fedyanin, V.A. Tartakovsky, *Energ. Compounds*, **2019** (26), 4189-4195 (2019). DOI: 10.1002/ejoc.201900314.
13. Y. Wang, S. Li, Y. Li, R. Zhang, D. Wang, S. Pang, *J. Mat. Chem. A*, **2**, 20806-20815 (2014). DOI: 10.1039/c4ta04716h.
14. N.E. Leonov, S.E. Semenov, M.S. Klenov, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, A.n. Pivkina, I.V. Fedyanin, D.B. Lempert, T.S. Kon'kova, Y.N. Matyushin, E.A. Miroshnichenko, V.A. Tartakovsky, *Mendeleev Comm.*, **31**, 789-791 (2021). DOI: 10.1016/j.mencom.2021.11.006.
15. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Prop., Explos., Pyrotech.*, **32** (1), 42-51 (2007). DOI: 10.1002/prep.200700006.
16. Д.Б. Лемперт, Г.Б. Манелис, *Химия в интересах устойчивого развития*, **13**, 855-858 (2005).
17. Е.Н. Аликина, *Аналитическая химия. Количественный анализ: учебное пособие*, Пермь, ПГНИУ, 2021, 252 с.
18. Г.А. Марченко, Л.Ф. Чертанова, Л.Ф. Антипин, Ю.Т. Стручков, Л.Н. Пунегова, *Докл. АН СССР Сер. хим.*, **294**, 1169-1172 (1987) [G.A. Marchenko, L.F. Chertanova, M.Yu. Antipin, Yu.T. Struchkov, L.N. Punegova, *Doklady Phys. Chem. (Engl. Transl.)*, **294**, 583-586 (1987)].
19. Л.Ф. Чертанова, Г.А. Марченко, В.И. Коваленко, Ю.Т. Стручков, *Изв. АН СССР Сер. хим.*, **37** (11), 2516-2518 (1988) [L.F. Chertanova, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, Y.N. Struchkov, *Bull. Acad. Sci. USSR. Div. Chem. Sci. (Engl. Transl.)*, **37** (11), 2266-2268 (1988). DOI: 10.1007/BF00959875].
20. В.В. Зверев, Р.Г. Исламов, Ф.Х. Исламова, В.М. Вакаръ, *Журн. структур. химии*, **30** (2), 69-73 (1989) [V.V. Zverev, R.G. Islamov, F.Kh. Islamova, V.M. Vakar', *J. Struct. Chem. (USSR)*, **30** (2), 228-232 (1989). DOI: 10.1007/BF00761310].
21. О.А. Литвинов, О.Н. Катаева, В.А. Наумов, Г.А. Марченко, В.И. Коваленко, *Журн. структур. химии*, **29** (3), 136-139 (1988) [O.A. Litvinov, O.N. Kataeva, V.A. Naumov, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, *J. Struct. Chem. (USSR)*, **29** (3), 469-471 (1988). DOI: 10.1007/BF00744007].
22. J. Crueiras, H. Maskill, W. MacFarlane, I. D. Menneer, A. Rios, M. A. Rios, *J. Phys. Org. Chem.*, **24**, 162-171 (2011). DOI: 10.1021/jr205449a.
23. И.Н. Зюзин, З.Г. Алиев, Т.К. Гончаров, Е.Л. Игнатъева, С.М. Алдошин, *Журн. структур. химии*, **58** (1), 119-124 (2017) [I.N. Zyuzin, Z.G. Aliev, T.K. Goncharova, S.M. Aldoshin, *Rus. J. Struct. Chem. (Engl. Transl.)*, **58** (1), 113-118 (2017). DOI: 10.1134/S0022476617010176].
24. Y. Xiong, Y. Shu, M. Yin, X. Long, Y. Zuo, X. Wang, *Chin. J. Energ. Mater.*, **18** (3), 247-251 (2010). DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.03.002.
25. И.Н. Зюзин, Г.Н. Ничипоренко, *Изв. АН, Сер. хим.*, **47** (11), 2389-2391 (1998) [I.N. Zyuzin, G.N. Nechiporenko, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)*, **47** (11), 2317-2318 (1998). DOI: 10.1007/BF02494309].
26. И.Н. Зюзин, Д.Б. Лемперт, *Журн. общ. химии*, **80** (9), 1473-1475 (2010) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Rus. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **80** (9), 1792-1794 (2010). DOI: 10.1134/S1070363210090124].
27. И.Н. Зюзин, Д.Б. Лемперт, *Журн. общ. химии*, **84** (1), 155-156 (2014) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Rus. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **84** (1), 162-163 (2014). DOI: 10.1134/S1070363214010253].
28. H. Li, F. Zhao, Q. Yu, W. Lai, B. Wang, *Chin. J. Energ. Mat.*, **22** (6), 880-883 (2014) DOI: 10.11943/j. issn.1006-9941.2014.06.032.
29. M.S. Klenov, O.V. Anikin, A.A. Guskov, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, I.V. Ananyev, I.S. Bushmarinov, A.O. Dmitrenko, K.A. Lyssenko, V.A. Tartakovsky, *Eur. J. Org. Chem.*, 3845-3855 (2015). DOI: 10.1002/ejoc.201600584.
30. З.Г. Алиев, И.Н. Зюзин, С.М. Алдошин, *Журн. структур. химии*, **57** (4), 798-801 (2016) [Z.G. Aliev, I.N. Zyuzin, S.M. Aldoshin, *Rus. J. Struct. Chem. (Engl. Transl.)*, **57** (4), 760-763 (2016). DOI: 10.1134/S0022476616040193].
31. N.E. Leonov, M.S. Klenov, O.V. Anikin, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, K.A. Monogarov, K.A. Tartakovsky, *Eur. J. Org. Chem.*, 91-94 (2019). DOI: 10.1002/ejoc.201801533.
32. И.Н. Зюзин, Д.Б. Лемперт, А.В. Набатова, А.И. Казаков, *Физ. гор. взрыв.*, **56** (4) 104-111 (2020) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, A.V. Nabatova, A.I. Kazakov, *Comb., Expl. Shock Wav. (Engl. Transl.)*, **56** (4), 464-470 (2020). DOI: 10.1134/S0010508220040103].
33. В.В. Захаров, И.Н. Зюзин, Б.Л. Корсунский, Т.С. Ларинова, Н.В. Чуканов, *Хим. физ.*, **41** (12), 7-12 (2022) [V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunskiy, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Russ. J. Phys. Chem. B (Engl. Transl.)*, **16** (5), 846-853 (2022). DOI: 10.1134/S1990793122050128].
34. В.В. Захаров, И.Н. Зюзин, Б.Л. Корсунский, Т.С. Ларинова, Н.В. Чуканов, *Хим. физ.*, **42** (1), 10-14 (2023) [V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunskiy, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Russ. J. Phys. Chem. B (Engl. Transl.)*, **17** (1), 55-59 (2023). DOI: 10.1134/S199079312301013X].
35. Т.И. Магсумов (рук. А.Г. Шамова), *XVIII Всерос. откр. конкурс юношеских исследовательских работ им.*

- В.И. Вернадского с междунар. участием, Проект № 110770 (2011).
36. Т.И. Магсумов, А.Г. Шамоу, Тез. докл. XIX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии (25-30 сентября), Волгоград, ВолгТУ, **1**, 278 (2011).
 37. А.Г. Шамоу, Т.И. Магсумов, Е.В. Николаева, Тез. докл. X Междунар. научн. конф. «Химическая термодинамика и кинетика» (17-21 мая), Великий Новгород, НовГУ им. Ярослава Мудрого, 270-271 (2020).
 38. Е.В. Николаева, I.V. Aristov, G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, VI North Caucasus Organic Chemistry Symposium (NCOCS2022) (18-22 апреля), Ставрополь, 248 (2022).
 39. Е.В. Николаева, И.В. Аристов, Г.М. Храпковский, А.Г. Шамоу, Сб. науч. тр. Двенадцатой междунар. научн. конф. «Химическая термодинамика и кинетика» (16-20 мая), Тверь, 197-198 (2022).
 40. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, G.M. Khrapkovskii, D.L. Egorov, A.G. Shamov, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2052, 012030 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012030.
 41. Е. Николаева, И. Аристов, Д. Чачков, Г. Храпковский, А. Шамоу, Сб. тез. Всерос. молодеж. научн. школы-конфер. «Актуальные проблемы органической химии» (АПОХ-2024) (15-21 марта), Шерегеш, 180 (2024).
 42. Е.В. Николаева, И.В. Аристов, Д.В. Чачков, Г.М. Храпковский, А.Г. Шамоу, *Изв. АН. Сер. хим.*, 71 (12), 2595-2604 (2022) [E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, D.V. Chachkov, G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)* 71 (12), 2595-2604 (2022). DOI: 10.1007/s11172-022-3688-7].
 43. Г.М. Храпковский, А.Г. Шамоу, Е.В. Николаева, Д.В. Чачков, *Успехи химии*, **78** (10), 980 (2009) [G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, *Russ. Chem. Rev. (Engl. Transl.)*, **78** (10), 903 (2009). DOI: 10.1070/RC2009v078n10ABEH004053].
 44. Е.В. Николаева, А.Г. Шамоу, Г.М. Храпковский, Х.Э. Харлампиди, *Журн. общ. химии*, **72** (5), 802 (2002). [E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii, Kh.E. Kharlampidi, *Russ. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **72** (5), 748 (2002). DOI: 10.1134/S1070363214110048].
 45. Д.В. Чачков, Д.Л. Егоров, Е.В. Николаева, А.Г. Шамоу, Г.М. Храпковский, *Вестник Казанского технологического университета*, 9, 44-49 (2010).
 46. Е.В. Николаева, Д.В. Чачков, А.Г. Шамоу, Г.М. Храпковский, *Изв. АН. Сер. хим.*, 67 (2), 274-281 (2018) [E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)*, 67 (2), 274-281 (2018). DOI: 10.1007/s11172-018-2070-2].
 47. Е.В. Николаева, А.Г. Шамоу, Г.М. Храпковский, *Журн. общ. хим.*, **84** (11), 1777-1779 (2014) [E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii // *Russ. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **84** (11), 2076-2078 (2014). DOI: 10.1134/S1070363214110048].
 48. Е.В. Николаева, Г.М. Храпковский, А.Г. Шамоу. В кол. мон. *Наука и образование в эпоху цифровизации*. МЦНП «Новая Наука», Петрозаводск, 2021, 57-73. DOI 10.46916/28052021-1-978-5-00174-242-5.
 49. Е.В. Николаева, И.В. Аристов, Д.В. Чачков, М.Е. Колпаков, Г.М. Храпковский, *Вестник технологического университета*, **27** (12) (в печати).
 50. Д.Н. Лайков, Дис. канд. ф.-м. наук, Московский гос. у-т, Москва, 2000, 97 с.
 51. Д.Л. Егоров, А. Г. Шамоу, Г.М. Храпковский, *Вестник технол. ун-та*, **18** (21), 12-15 (2015).
 52. A.D. Becke, *Phys. Rev. A*, **38**, 3098-3100 (1988). DOI: 10.1103/physreva.38.3098.
 53. C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, *Phys. Rev. B*, **37**, 785-789 (1988). DOI: 10.1103/physrevb.37.785.
 54. G.A. Petersson, A. Bennett, T.G. Tensfeldt, M.A. Al-Laham, W.A. Shirley, J. Mantzaris, *J. Chem. Phys.*, **89**, 2193-2218 (1988). DOI: 10.1063/1.455064.
 55. G.A. Petersson, M.A. Al-Laham, *J. Chem. Phys.*, **94**, 6081-6090 (1991). DOI: 10.1063/1.460447.
 56. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, *Phys. Chem., Chem. Phys.*, **10**, 6615-6620 (2008). DOI: 10.1039/B810189B.
 57. F. Weigend, R. Ahlrichs, *Phys. Chem., Chem. Phys.*, **7**, 3297-3305 (2005). DOI: 10.1039/B508541A.
 58. L.A. Curtiss, P.C. Redfern, K. Raghavachari, *J. Chem. Phys.*, **126**, 084108 (2007). DOI: 10.1063/1.2436888.
 59. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A.V. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A.Jr. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, Heyd J.J., E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T.A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, D.J. Fox, *Gaussian 16 Revision B.01*, Gaussian Inc., Wallingford CT (2016).

References

1. W. Traube, *Ann Chemie (Paris)*, **300**, 81-128 (1898).
2. E. P. Kirpichev, I. N. Zyuzin, V. V. Avdonin, Y.I. Rubtsov, D.B. Lempert, *Zhurn. fiz. khimii*, **80** (9), 1543-1546 (2006) [E.P. Kirpichev, I.N. Zyuzin, V.V. Avdonin, Yu.I. Rubtsov, D.B. Lempert, *Rus. J. Phys. Chem. A. (Engl. Transl.)*, **80** (9), 1359-1362 (2006). DOI: 10.1134/S0036024406090019].
3. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, G.N. Nichiporenko, *Izv. AN USSR Ser. chem.*, **37** (7), 1506-1509 (1988) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, G.N. Nechiporenko, *Bull. Acad. Sci. USSR. Div. Chem. Sci. (Engl. Transl.)*, **37** (7), 1329-1332 (1988). DOI: 10.1007/BF00962732].
4. B.E. Krisyuk, T.V. Syrko, I.N. Zyuzin, *J. Phys. Org. Chem.*, **35**, e4407 (2022). DOI: 10.1002/poc.4407.
5. P.J. Crutzen, *Ann. Rev. Earth Planet. Sci.*, **7**, 443-472 (1979). DOI: 10.1146/annurev.ea.07.050179.002303.
6. P. G. Wang, M. Xian, X. Tang, X. Wu, Z. Wen, T. Cai, A. J. Janczuk, *Chem. Rev.*, **102**, 1091-1134 (2002). DOI: 10.1021/cr000040l.
7. J. A. Hrabie, L. K. Keefer, *Chem. Rev.*, **102**, 1135-1154 (2002). DOI: 10.1021/cr000028t.
8. T.B. Cai, X. Tang, J. Nagorski, P.G. Brauschweiger, P.G. Wang, *Bioorg. Med. Chem.*, **11**, 4971-4975 (2003). DOI: 10.1016/j.bmc.2003.09.003.
9. J. Brand, T. Huhn, U. Groth, J.C. Jochims, *Chem. Eur. J.*, **12**, 499-509 (2006). DOI: 10.1002/chem.200500325.
10. P. G. Wang, T. B. Cai, N. Taniguchi (eds.), *Nitric oxide donors: for pharmaceutical and biological applications*, Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005, 368 p.
11. T.-C. Li, L. Yang, Z.-M. Li, T.-L. Zhang, *Chin. J. Energ. Mat.*, **20** (3), 371-379 (2012). DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.03.023.
12. O.V. Anikin, N.E. Leonov, M.S. Klenov, A.M. Churakov, A.A. Voronin, A.A. Guskov, N.V. Muravyev, Y.A. Strelenko, I.V. Fedyanin, V.A. Tartakovsky, *Energ. Compounds*, **2019** (26), 4189-4195 (2019). DOI: 10.1002/ejoc.201900314.

13. Y. Wang, S. Li, Y. Li, R. Zhang, D. Wang, S. Pang, *J. Mat. Chem. A*, **2**, 20806-20815 (2014). DOI: 10.1039/c4ta04716h.
14. N.E. Leonov, S.E. Semenov, M.S. Klenov, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, A.n. Pivkina, I.V. Fedyanin, D.B. Lempert, T.S. Kon'kova, Y.N. Matyushin, E.A. Miroshnichenko, V.A. Tartakovsky, *Mendeleev Comm.*, **31**, 789-791 (2021). DOI: 10.1016/j.mencom.2021.11.006.
15. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Prop., Explos., Pyrotech.*, **32** (1), 42-51 (2007). DOI: 10.1002/prep.200700006.
16. D.B. Lempert, G.B. Manelis, *Chemistry for Sustainable Development*, **13**, 855-858 (2005).
17. E.N. Alikina, *Analytical chemistry. Quantitative analysis: textbook*, Perm, PGNIU, 2021, 252 p.
18. G.A. Marchenko, L.F. Chertanova, L.F. Antipin, Y.T. Struchkov, L.N. Punegova, *Dokl. AN USSR Ser. chem.*, **294**, 1169-1172 (1987) [G.A. Marchenko, L.F. Chertanova, M.Yu. Antipin, Yu.T. Struchkov, L.N. Punegova, *Doklady Phys.Chem. (Engl. Transl.)*, **294**, 583-586 (1987)].
19. L.F. Chertanova, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, Y.T. Struchkov, *Izv. AN USSR Ser. Chem.*, **37** (11), 2516-2518 (1988) [L.F. Chertanova, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, Y.N. Struchkov, *Bull. Acad. Sci. USSR. Div. Chem. Sci. (Engl. Transl.)*, **37** (11), 2266-2268 (1988). DOI: 10.1007/BF00959875].
20. V.V. Zverev, R.G. Islamov, F.Kh. Islamova, V.M. Vakar, *Zhurn. structur. chemii*, **30** (2), 69-73 (1989) [V.V. Zverev, R.G. Islamov, F.Kh. Islamova, V.M. Vakar', *J. Struct. Chem. (USSR)*, **30** (2), 228-232 (1989). DOI: 10.1007/BF00761310].
21. O.A. Litvinov, O.N. Kataeva, V.A. Naumov, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, *Zhurn. struct. chemii*, **29** (3), 136-139 (1988) [O.A. Litvinov, O.N. Kataeva, V.A. Naumov, G.A. Marchenko, V.I. Kovalenko, *J. Struct. Chem. (USSR)*, **29**(3), 469-471 (1988). DOI: 10.1007/BF00744007].
22. J. Crueiras, H. Maskill, W. MacFarlane, I. D. Menneer, A. Rios, M. A. Rios, *J. Phys. Org. Chem.*, **24**, 162-171 (2011). DOI: 10.1021/jr205449a.
23. I.N. Zyuzin, Z.G. Aliev, T.K. Goncharov, E.L. Ignatyeva, S.M. Aldoshin, *Zhurn. structur. chemii*, **58** (1), 119-124 (2017) [I.N. Zyuzin, Z.G. Aliev, T.K. Goncharova, S.M. Aldoshin, *Rus. J. Struct. Chem. (Engl. Transl.)*, **58** (1), 113-118 (2017). DOI: 10.1134/S0022476617010176].
24. Y. Xiong, Y. Shu, M. Yin, X. Long, Y. Zuo, X. Wang, *Chin. J. Energ. Mater.*, **18** (3), 247-251 (2010). DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.03.002.
25. I.N. Zyuzin, G.N. Nicheporenko, *Izv. AN, Ser. chem.*, **47** (11), 2389-2391 (1998) [I.N. Zyuzin, G.N. Nicheporenko, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)*, **47** (11), 2317-2318 (1998). DOI: 10.1007/BF02494309].
26. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Journal of General Chemistry*, **80** (9), 1473-1475 (2010) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Rus. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **80** (9), 1792-1794 (2010). DOI: 10.1134/S1070363210090124].
27. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Jurn. obshchestvenn. chemii*, **84** (1), 155-156 (2014) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, *Rus.J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, **84** (1), 162-163 (2014). DOI: 10.1134/S1070363214010253].
28. H. Li, F. Zhao, Q. Yu, W. Lai, B. Wang, *Chin. J. Energ. Mat.*, **22** (6), 880-883 (2014) DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2014.06.032.
29. M.S. Klenov, O.V. Anikin, A.A. Guskov, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, I.V. Ananyev, I.S. Bushmarinov, A.O. Dmitrenko, K.A. Lyssenko, V.A. Tartakovsky, *Eur. J. Org. Chem.*, 3845-3855 (2015). DOI: 10.1002/ejoc.201600584.
30. Z.G. Aliev, I.N. Zyuzin, S.M. Aldoshin, *Journ. of Structural Chemistry*, **57** (4), 798-801 (2016) [Z.G. Aliev, I.N. Zyuzin, S.M. Aldoshin, *Rus. J. Struct. Chem. (Engl. Transl.)*, **57** (4), 760-763 (2016). DOI: 10.1134/S0022476616040193].
31. N.E. Leonov, M.S. Klenov, O.V. Anikin, A.M. Churakov, Y.A. Strelenko, K.A. Monogarov, K.A. Tartakovsky, *Eur.J. Org. Chem.*, 91-94 (2019). DOI: 10.1002/ejoc.201801533.
32. I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, A.V. Nabatova, A.I. Kazakov, *Phys. Hort. Explos.*, **56** (4) 104-111 (2020) [I.N. Zyuzin, D.B. Lempert, A.V. Nabatova, A.I. Kazakov, *Comb., Expl. Shock Wav. (Engl. Transl.)*, **56** (4), 464-470 (2020). DOI 10.1134/S0010508220040103].
33. V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunsky, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Chem. Phys.*, **41** (12), 7-12 (2022) [V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunskiy, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Russ. J. Phys. Chem. B (Engl. Transl.)*, **16** (5), 846-853 (2022). DOI: 10.1134/S1990793122050128].
34. V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunsky, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Chem. Phys.*, **42** (1), 10-14 (2023) [V.V. Zakharov, I.N. Zyuzin, B.L. Korsunskiy, T.S. Larikova, N.V. Chukanov, *Russ. J. Phys. Chem. B (Engl. Transl.)*, **17** (1), 55-59 (2023). DOI: 10.1134/S199079312301013X].
35. T.I. Magsumov (A.G. Shamov), *XVIII All-Russian open competition of youth research works named after V.I. Vernadsky. V.I. Vernadsky with international participation*, Project No. 110770 (2011).
36. T.I. Magsumov, A.G. Shamov, *Proc. of XIX Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry* (September 25-30), Volgograd, VolGTU, **1**, 278 (2011).
37. A.G. Shamov, T.I. Magsumov, E.V. Nikolaeva, *Proc. of X International Scientific Conference "Chemical Thermodynamics and Kinetics"* (May 17-21), Veliky Novgorod, Yaroslavl the Wise Novgorod State University, 270-271 (2020).
38. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, *VI North Caucasus Organic Chemistry Symposium (NCOCS2022)* (April 18-22), Stavropol, 248 (2022).
39. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, G.M. Khrapkovsky, A.G. Shamov, *Collection of scientific works of the Twelfth International Scientific Conference. "Chemical Thermodynamics and Kinetics"* (May 16-20), Tver, 197-198 (2022).
40. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, G.M. Khrapkovskii, D.L. Egorov, A.G. Shamov, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2052, 012030 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012030.
41. E. Nikolaeva, I. Aristov, D. Chachkov, G. Khrapkovsky, A. Shamov, *Sb. abstracts. All-Russian Youth Scientific School-Conference "Actual Problems of Organic Chemistry. "Actual Problems of Organic Chemistry" (APOCH-2024)* (March 15-21), Sheregesh, 180 (2024).
42. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, D.V. Chachkov, G.M. Khrapkovsky, A.G. Shamov, *Izv. AN. Ser. Chem.*, 71 (12), 2595-2604 (2022) [E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, D.V. Chachkov, G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)* 71 (12), 2595-2604 (2022). DOI: 10.1007/s11172-022-3688-7].
43. G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, *Uspekhi Chemii*, **78** (10), 980 (2009) [G.M. Khrapkovskii, A.G. Shamov, E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, *Russ. Chem. Rev. (Engl. Transl.)*, **78** (10), 903 (2009). DOI: 10.1070/RC2009v078n10ABEH004053].
44. E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovsky, H.E. Kharlampidi, *Zhurn. obshchestvennykh chemii*, **72** (5), 802 (2002). [E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii, Kh.E. Kharlampidi, *Russ. J. Gen.Chem. (Engl. Transl.)*, **72** (5), 748 (2002). DOI: 10.1134/S1070363214110048].
45. D.V. Chachkov, D.L. Egorov, E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovsky, *Herald of Kazan Technological University*, 9, 44-49 (2010).

46. E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, A.G. Shamov, and G.M. Khrapkovsky, *Izv. of Sci. Ser. Chem.*, 67 (2), 274-281 (2018) [E.V. Nikolaeva, D.V. Chachkov, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii, *Russ. Chem. Bull. (Engl. Transl.)*, 67 (2), 274-281 (2018). DOI: 10.1007/s11172-018-2070-2].
47. E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii, *Jurn. obshchet. chem.*, 84 (11), 1777-1779 (2014) [E.V. Nikolaeva, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovskii // *Russ. J. Gen. Chem. (Engl. Transl.)*, 84 (11), 2076-2078 (2014). DOI: 10.1134/S1070363214110048].
48. E.V. Nikolaeva, G.M. Khrapkovsky, A.G. Shamov. In Coll. mon. *Science and education in the era of digitalization*. ICNP "Novaya Nauka", Petrozavodsk, 2021, 57-73. DOI 10.46916/28052021-1-978-5-00174-242-5.
49. E.V. Nikolaeva, I.V. Aristov, D.V. Chachkov, M.E. Kolpakov, G.M. Khrapkovsky, *Herald of Technological University*, 27 (12) (in press).
50. D.N. Laikov, Cand. of Ph.-M. Sciences, Moscow State University, Moscow, 2000, 97 p.
51. D.L. Egorov, A.G. Shamov, G.M. Khrapkovsky, *Herald of Technological University*, 18 (21), 12-15 (2015).
52. A.D. Becke, *Phys. Rev. A*, 38, 3098-3100 (1988). DOI: 10.1103/physreva.38.3098.
53. C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, *Phys. Rev. B*, 37, 785-789 (1988). DOI: 10.1103/physrevb.37.785.
54. G.A. Petersson, A. Bennett, T.G. Tensfeldt, M.A. Al-Laham, W.A. Shirley, J. Mantzaris, *J. Chem. Phys.*, 89, 2193-2218 (1988). DOI: 10.1063/1.455064.
55. G.A. Petersson, M.A. Al-Laham, *J. Chem. Phys.*, 94, 6081-6090 (1991). DOI: 10.1063/1.460447.
56. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, *Phys. Chem. Phys.*, 10, 6615-6620 (2008). DOI: 10.1039/B810189B.
57. F. Weigend, R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Phys.*, 7, 3297-3305 (2005). DOI: 10.1039/B508541A.
58. L.A. Curtiss, P.C. Redfern, K. Raghavachari, *J. Chem. Phys.*, 126, 084108 (2007). DOI: 10.1063/1.2436888.
59. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A.V. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A.Jr. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, Heyd J.J., E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T.A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, D.J. Fox, *Gaussian 16 Revision B.01*, Gaussian Inc., Wallingford CT (2016).

© **Е. В. Николаева** – кандидат химических наук, доцент, ведущий специалист по технической поддержке Центра автоматизированных систем управления, старший научный сотрудник лаборатории Получения целлюлозы для химической переработки и эфиров на ее основе, Казанский национальный исследовательский технологический университет, (КНИТУ), Казань, Россия, NikolaevaEV@corp.knrtu.ru; **И. В. Аристов** – главный программист Центра эксплуатации кампусной мультисервисной вычислительной сети, КНИТУ, aristov@kstu.ru; **Д. В. Чачков** – кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия; ведущий научный сотрудник, Казанское отделение Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН – филиал Федерального научного центра «Научно-исследовательский институт системных исследований РАН», Казань, Россия, de2005c@gmail.com; **М. Е. Колпаков** – доктор химических наук, доцент, профессор кафедры Аналитической химии, сертификации и менеджмента качества, КНИТУ, KolpakovME@corp.knrtu.ru; **Г. М. Храпковский** – доктор химических наук, профессор, КНИТУ, khrapkovskii@kstu.ru.

© **E. V. Nikolaeva** – PhD (Chemical Sci.), Associate professor, Leading Technical Support Specialist of the Center for Automated Control System, The Senior Research Associate of Laboratory of Receiving Cellulose for Chemical Processing And Air On Its Basis, Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, NikolaevaEV@corp.knrtu.ru; **I. V. Aristov** – Chief Programmer of the Center for Operation of Campus Multiservice Computing Network, KNRTU, aristov@kstu.ru; **D. V. Chachkov** – PhD (Chemical Sci.), Leading Researcher of the National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia; Leading Researcher of the Kazan Branch of the Interdepartmental Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences – A Branch of The Federal Scientific Center «Research Institute for System Research of the Russian Academy of Sciences», de2005c@gmail.com; **M. E. Kolpakov** – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Docent, Professor of the Analytical Chemistry, Certification and Quality Management department, KNRTU, KolpakovME@corp.knrtu.ru; **G. M. Khrapkovskii** – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Professor, KNRTU, khrapkovskii@kstu.ru.