

ЭНЕРГИИ СВЯЗЕЙ И ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ

Е. А. Мирошниченко¹, Т. С. Конькова², Ю. Н. Матюшин³, А. А. Берлин⁴

Аннотация: На основе фундаментальных определений химической физики предложена методика расчета энергий связей и энергий перестройки фрагментов молекул в радикалы после мономолекулярной радикальной реакции распада молекул. Определены энергии перестройки и энергии связей для соединений состава $C_nH_mO_cN_d$ различных классов, в том числе для полирадикалов.

Ключевые слова: энергия связи; радикал; энергия перестройки радикала

Литература

1. Семенов Н. Н. 1958. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. — М.: Изд-во АН СССР. 686 с.
2. Мирошниченко Е. А., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энтальпия образования радикала 3-метилфуразанила-4 // Докл. РАН, 2014. Т. 456. № 6. С. 673–675.
3. CODATA key values for Values for Thermodynamics / Eds. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev. — New York, Washington, Philadelphia, London, 1989.
4. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. Vol. 1. — Texas, USA: Thermodynamic Research Center. College Station, 1994. 209 p.
5. Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш. Термохимия органических свободных радикалов. — М.: Наука, 2001. 304 с.
6. Luo Y. Comprehensive handbook of chemical bond energies. — Boca Raton – London – New York: CRC Press, 2007. 1655 p.
7. Назин Г. М., Манелис Г. Б. Термическое разложение алифатических нитросоединений // Успехи химии, 1994. Т. 63. № 4. С. 327–337.

Поступила в редакцию 01.11.14

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, упрm@polymer.chph.ras.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, berlin@chph.ras.ru