

ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА p - $C_6H_5C(O_2H)NC_6H_4OH$ И ЦЕПНОЕ ОКИСЛЕНИЕ p -БЕНЗИЛФЕНОЛА*

Г. А. Поскрёбышев¹, А. А. Поскрёбышев²

Аннотация: С помощью современных методов молекулярного моделирования определены значения $\Delta_f H^\circ(1, CORR)_{HR_{mean}} = -105,5 \pm 6,9$ Дж/моль и $S^\circ(1, CORR)_{IRot} = 517,9$ Дж/(моль·К) p -бензилгидропероксидфенола ($C_6H_5NC(O_2H)C_6H_4OH$, 1). Рассчитанные значения позволили установить, что реакции $C_6H_5NC(O_2)C_6H_4OH$ с p -бензилфенолом ($C_6H_5CH_2C_6H_4OH$), ведущие к образованию $C_6H_5C\cdot NC_6H_4OH$ и $C_6H_5CH_2C_6H_4O\cdot$, являются термодинамически благоприятными. Как следствие, предполагается, что добавление p -бензилфенола в метановоздушные смеси может привести к снижению времени их воспламенения.

Ключевые слова: p -бензилфенол; цепное окисление; энтальпия образования; гидропероксид; $C_{13}H_{12}O_3$

DOI: 10.30826/CE23160101

EDN: RBDVPM

Литература

1. Поскрёбышев Г. А., Поскрёбышев А. А. Термохимия реакций $C_6H_5CH_2C_6H_4O\cdot$ и $C_6H_5CH\cdot C_6H_4OH$ с O_2 , а также избранных реакций их мономолекулярного распада // Горение и взрыв, 2021. Т. 14. № 3. С. 17–26.
2. Poskrebyshev G. A. The values of $\Delta_f H_{298.15}^\circ$ and $S_{298.15}^\circ$ of the radicals formed by the abstraction of H atom from the p -Benzylphenol and Dimethyl Phthalate // Int. J. Chem. Kinet., 2022. Vol. 54. No. 11. P. 619–646.
3. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys., 1993. Vol. 98. P. 5648.
4. Zhao Y., Truhlar D. G. The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: Two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals // Theor. Chem. Acc., 2008. Vol. 120. P. 215.
5. Ochterski J. W., Petersson G. A., Montgomery J. A., Jr. A complete basis set model chemistry. V. Extensions to six or more heavy atoms // J. Chem. Phys., 1996. Vol. 104. P. 2598–2619.
6. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Petersson G. A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A. V., Bloino J., Janesko B. G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H. P., Ortiz J. V., Izmaylov A. F., Sonnenberg J. L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V. D., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Hon-
7. da Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J. A., Jr., Peralta J. E., Ogliaro F., Bearpark M. J., Heyd J. J., Brothers E. N., Kudin K. N., Staroverov V. N., Keith T. A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A. P., Burant J. C., Iyengar S. S., Tomasi J., Cossi M., Millam J. M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J. W., Martin R. L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J. B., Fox D. J. Gaussian 16, Revision C.01. Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc., 2016.
8. Poskrebyshev G. A. Структура и термодинамические свойства феноксильных радикалов, образованных из компонентов суррогата биомасел // Горение и взрыв, 2018, Т. 11. № 4. С. 14–22.
9. Poskrebyshev G. A. The CBS values of $\Delta_f H_{298.15}^\circ$ and $S_{298.15}^\circ$ of the phenoxy radicals, formed by abstraction of H atom from the components of surrogate bio-oil // Comput. Theor. Chem., 2019. Vol. 1169. 112625.
10. Afeefy H. Y., Liebman J. F., Stein S. E. Neutral Thermochemical Data in NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69 / Eds. P. J. Linstrom, W. G. Mallard. — Gaithersburg, MD, USA: National Institute of Standards and Technology, 2016. <http://webbook.nist.gov>.
11. Ruscic B., Bross D. H. Active Thermochemical Tables (ATcT) values based on ver. 1.124 of the Thermochemical Network. — Argonne National Laboratory, 2018. ATcT.anl.gov.

* Авторы выражают благодарность Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за финансовую поддержку представленной работы.

¹ Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, poskr@chph.ras.ru

² Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; МГТУ им. Н. Э. Баумана, poskr@mail.ru

12. *Goos E., Burcat A., Ruscic B.* Extended Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Update of Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables Alexander Burcat and Branko Ruscic Report ANL 05/20 and TAE 960 Technion-IIT, Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division, September 2005.
13. *Poskrebyshv G. A.* The standard thermochemical properties of the p-Benzylphenol and dimethyl phthalate, and their temperature dependencies // *Comput. Theor. Chem.*, 2021. Vol. 1197. 113146.
14. *Verevkin S. P.* Thermochemistry of aromatic ketones. Experimental enthalpies of formation and structural effects // *Thermochim. Acta*, 1998. Vol. 310. P. 229–235.
15. Онлайн программа для расчета термодинамических свойств соединений с использованием Joback метода. <https://www.chemeo.com>.
16. *Kashinski D. O., Chase G. M., Nelson R. G., Di Nallo O. E., Scales A. N., VanderLey D. L., Byrd E. F. C.* Harmonic vibrational frequencies: Approximate global scaling factors for TPSS, M06, and M11 functional families using several common basis sets // *J. Phys. Chem. A*, 2017. Vol. 121. P. 2265–2273.

Поступила в редакцию 23.12.2022