

ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ АЗИДОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

Е. А. Мирошниченко¹, Ю. Н. Матюшин², Т. С. Конькова³, Ю. Д. Орлов⁴, А. Б. Воробьев⁵, В. П. Воробьева⁶, Я. О. Иноземцев⁵

Аннотация: Определены энтальпии образования в стандартном состоянии и газовой фазе ряда азидосодержащих соединений. На основе полученных данных и энтальпий образования радикалов определены энергии диссоциации связей С–N. Используя фундаментальные соотношения химической физики, предложена методика расчета энергии перестройки фрагментов молекул в радикалы по схеме «двойной разности». Эта расчетная схема позволила определить энергию перехода фрагмента молекул N₃ в радикал N₃[•].

Ключевые слова: энтальпии образования и испарения; метод расчета «двойной разности»; радикал; энергия реорганизации; энергия диссоциации связи

Литература

1. Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В., Матюшин Ю. Н. Калориметрия энергоемких соединений // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 260–270.
2. Конькова Т. С., Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Воробьев А. Б., Иноземцев Я. О., Далингер И. Л., Шкинева Т. К., Шевелев С. А. Энергии солеобразования гетероциклических соединений // Горение и взрыв, 2015. Т. 8. № 2. С. 175–185.
3. Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Мирошниченко Е. А., Воробьев А. Б. Термохимические свойства солей щелочных металлов тринитрофлороглуцина // Горение и взрыв, 2016. Т. 9. № 2. С. 136–145.
4. CODATA key values for thermodynamics / Eds. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev. — New York – Washington – Philadelphia – London, 1989. Final Report of the CODATA Task Group on Key Values for Thermodynamics.
5. Семенов Н. Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. — М.: Изд-во АН СССР, 1958. 686 с.
6. Мирошниченко Е. А., Пащенко Л. Л., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов // Известия РАН. Сер. хим., 2016. № 8. С. 1977–1980.
7. Pedley J. B., Naylor R. D., Kirby C. P. Thermochemical data of organic compounds. — London – New York: Chapman and Hall, 1986. 792 p.
8. Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш. Термохимия органических свободных радикалов. — М.: Наука, 2001. 304 с.
9. Luo Y. Comprehensive handbook of chemical bond energies. — Boca Raton – London – New York: CRC Press, 2007. 1655 p.

Поступила в редакцию 10.01.17

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

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm@polymer.chph.ras.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

⁴Тверской государственный университет, yurij.orlov@tversu.ru

⁵Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectr1@yandex.ru

⁶Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук