

КАРКАСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ. ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ*

Е. А. Мирошниченко¹, Т. С. Конькова², Ю. Н. Матюшин³, А. Б. Воробьев³, Я. О. Иноземцев⁴, А. В. Иноземцев⁴

Аннотация: На основе соотношений, связывающих энергетические характеристики соединений (энтальпии образования, энтальпии атомизации, энергии диссоциации химических связей, средние термодинамические энергии связей, энергии перестройки фрагментов молекулы в радикалы — энергии перестройки радикалов) определены энергии перестройки радикалов каркасных соединений. Показано применение простого разностного метода и метода двойных разностей для оценки и контроля энтальпий образования радикалов и веществ. В расчетах использовали также закономерности, выявленные ранее для средних термодинамических энергий связей алифатических соединений и энергий перестройки радикалов.

Ключевые слова: каркасные соединения; энергии химических связей; энергии диссоциации связей; энтальпии образования радикалов; энтальпии атомизации; энергии перестройки радикалов

DOI: 10.30826/CE19120114

Литература

1. Семёнов Н. Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. — М.: Изд-во АН СССР, 1958. 686 с.
2. Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш. Термодинамика органических свободных радикалов. — М.: Наука, 2001. 304 с.
3. Luo Y. Comprehensive handbook of chemical bond energies. — Boca Raton — London — New York: CRC Press, 2007. 1655 p.
4. Мирошниченко Е. А., Орлов Ю. Д., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энергетические характеристики химических связей и перестройки радикалов // Докл. РАН, 2015. Т. 465. № 3. С. 325–328.
5. 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.
6. Мирошниченко Е. А., Пащенко Л. Л., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов // Изв. РАН. Сер. хим., 2016. № 8. С. 1977–1980.
7. Lukyanova V. A., Pimenova S. M., Druzhinina A. I., Tarazanov S. M., Dorofeeva O. V. Standard enthalpy of formation diphenil oxide // J. Chem. Thermodyn., 2017. Vol. 124. P. 43–48.
8. Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С. Метод оценки термодинамических свойств соединений солевой структуры // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 277–287.
9. Kon'kova T. S., Matyushin Y. N., Miroshnichenko E. A., Inozemtsev A. V. Calculation of enthalpies of formation for complex salt compounds with energetic ligands // Advances in nonequilibrium processes: Plasma, combustion, and atmosphere. — Moscow: TORUS PRESS, 2014. P. 38–43.
10. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. — TRC data ser. — College Station, TX, USA: Thermodynamic Research Center, 1994. Vol. 1. 581 p.
11. Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С., Орлов Ю. Д., Берлин А. А. Энергии перестройки азидо-нитроароматических соединений // Докл. РАН, 2017. Т. 477. № 4. С. 429–432.
12. Emel'janenko V. N., Narigmanov R. N., Verevkin S. P. Benchmarking thermochemical experiments and calculations of nitrogen-containing substituted adamantanes // J. Therm. Anal. Calorim., 2017. Vol. 128. P. 1535–1546.

Поступила в редакцию 25.12.18

*Работа выполнена частично за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 44.8 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоёмких материалов и разработка научных основ управления этими процессами (0082-2016-0011)», номер гос. регистрации АААА-А17-117040610346-5, и теме 49.23 «Создание синтетических жидких топлив для военной авиации и ракетно-космической техники и разработка новых технологий получения компонентов специальных топлив тема (0082-2018-0004)», номер гос. регистрации АААА-А18-118031590088-8.

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, ynm07@mail.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectr1@yandex.ru