

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ 1-НИТРОНАФТАЛИНА*

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

Аннотация: На основе энтальпий образования в газовой фазе ряда производных нафталина методом двойной разности определена энтальпия образования радикала нафтил-1. По этой величине определена энтальпия образования 1-нитронафталина в газовой фазе 133 кДж/моль. Полученное значение существенно отличается от имеющихся в литературе данных (111,2 и 145,0 кДж/моль). Получена оценка энергии диссоциации связи C–NO₂ в 1-нитронафталине и проведено ее сравнение с энергией диссоциации связи в нитробензоле.

Ключевые слова: метод двойной разности; энтальпии образования; энергии диссоциации связей; ароматические соединения

DOI: 10.30826/CE20130116

Литература

1. *Pedley J. B.* Thermochemical data and structures of organic compounds. — TRC data ser. — College Station, TX, USA: Thermodynamic Research Center, 1994. Vol. 1. 807 p.
2. *Ribeiro da Silva M. A. V., Amarel L. M. P. F., Santos A. F. L. O. M., Gomes J. R. B.* Thermochemistry of nitronaphthalenes and nitroantracenes // *J. Chem. Thermodyn.* 2006. Vol. 38. P. 748–755.
3. *Suntsova M. A., Dorofeeva O. V.* Use of G4 theory for the assesment of inaccuracies in experimental enthalpies of formation of aromatic nitro compounds // *J. Chem. Eng. Data*, 2016. No. 1. P. 313–329.
4. *Мирошниченко Е. А., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А.* Энтальпия образования радикала 3-метилфуразанила-4 // *Докл. Акад. наук*, 2014. Т. 465. № 6. С. 673–675. doi: 10.7868/S0869565214180145.
5. *Мирошниченко Е. А., Пащенко Л. Л., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А.* Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов // *Изв. Акад. наук. Сер. хим.*, 2016. № 8. С. 1977–1980.
6. *Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш.* Термохимия органических свободных радикалов. — М.: Наука, 2001. 304 с.
7. *Luo Y.* Comprehensive handbook of chemical bond energies. — Boca Raton – London – New York: CRC Press, 2007. 1655 p.
8. *Yagofarov M. I., Nagrimanov R. N., Ziganshin M. A., Solomonov B. N.* New aspects of relationship between the enthalpies of fusion of aromatic compounds at the melting temperatures and the enthalpies of solution in benzene at 298.15 K. Part I // *J. Chem. Thermodyn.* 2018. Vol. 116. P. 152–158.
9. *Nagrimanov R. N., Samatov A. A., Buzyurov A. V., Kurshv A. G., Ziganshin M. A., Solomonov B. N.* Thermochemical properties of mono- and di-ciano-aromatic compounds at 298.15 K // *Thermochim. Acta*, 2018. Vol. 668. No. 10. P. 152–158.
10. *Stevens W. R., Ruscic B., Baer T.* Heats of formation of C₆H₅[•], C₆H₅⁺, C₆H₅NO by threshold photoelectron photoion coincidence and active thermochemical tables analysis // *J. Phys. Chem. A*, 2010. P. 13134–13145.

Поступила в редакцию 05.11.2019

* Научно-исследовательская работа выполнена частично за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания, тема 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm07@mail.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectr1@yandex.ru