

# 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\*

Г. А. Поскрёбышев<sup>1</sup>, А. А. Поскрёбышев<sup>2</sup>

**Аннотация:** С помощью современных методов молекулярного моделирования определены термодинамические свойства продуктов взаимодействия  $C_6H_5CH_2C_6H_4O\cdot$  и  $C_6H_5CH\cdot C_6H_4OH$  радикалов с молекулярным кислородом, а также продуктов их мономолекулярного распада. На основе полученных значений рассчитана термодинамика рассмотренных реакций и оценены значения их активационных барьеров.

**Ключевые слова:** p-бензилфенол радикал; пероксидный радикал; энтальпия

**DOI:** 10.30826/CE21140303

## Литература

1. Czernik S., Bridgwater A. V. Overview of applications of biomass fast pyrolysis oil // *Energ. Fuel.*, 2004. Vol. 18. P. 590–598.
2. Poskrebyshv G. A., Wang H. Surrogate bio-oil // *Catalysis Center for Energy Innovation (CCEI) Spring Symposium*. — Newark, DE: University of Delaware, 2010.
3. Поскрёбышев Г. А. Химический состав модельного биомасла для расчета и оптимизации производства биотоплив // Тезисы конференции «Авиадвигатели XXI века». — М.: ЦИАМ, 2015. С. 1016–1017. <http://www.aeroconf.ciam.ru/node/27?lang=rus>.
4. Поскрёбышев Г. А. Химический состав суррогатной смеси для анализа продуктов и оптимизации условий радиационно-химической переработки биомасел // VI Российская конференция «Актуальные проблемы химии высоких энергий»: сборник статей. — М.: Изд-во «Граница», 2015. С. 296–298.
5. Correia C. F., Borges dos Santos R. M., Estácio S. G., Telo J. P., Cabral B. J. C., Simões J. A. M. Reaction of para-hydroxy-substituted diphenylmethanes with tert-butoxy radical // *ChemPhysChem*, 2004. Vol. 5. Iss. 8. P. 1217–1221.
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., Honda 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.
7. Поскрёбышев Г. А. Структура и термодинамические свойства феноксильных радикалов, образованных из компонентов суррогата бионефти // *Горение и взрыв*, 2018. Т. 11. № 4. С. 14–22.
8. Poskrebyshv 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. P. 12625.
9. Poskrebyshv G. A. The standard thermochemical properties of the p-benzylphenol and dimethyl phthalate, and their temperature dependencies // *Comput. Theor. Chem.*, 2021. Vol. 1171. # 113146.
10. 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.

\* Авторы благодарят Министерство науки и высшего образования Российской Федерации (AAAA-A20-120011390097-9 и AAAA-A20-120011390099-3) за поддержку представленных исследований.

<sup>1</sup>Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, [gposkr@chph.ras.ru](mailto:gposkr@chph.ras.ru)

<sup>2</sup>Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук; Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, [poskr@mail.ru](mailto:poskr@mail.ru)

11. *Ruscic B., Bross D.H.* Active Thermochemical Tables (ATcT) values based on ver. 1.122d of the Thermochemical Network. — Argonne National Laboratory, 2018. ATcT.anl.gov.
12. *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>.
13. Precomputed scaling factors. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database — SRD 101. III.B.3.a. <https://cccbdb.nist.gov/vibscalejust.asp>.

*Поступила в редакцию 15.08.2021*