

## ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ АМИНИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ\*

Е. А. Мирошниченко<sup>1</sup>, Т. С. Конькова<sup>2</sup>, Ю. Н. Матюшин<sup>3</sup>, А. Б. Воробьев<sup>3</sup>,  
Я. О. Иноземцев<sup>4</sup>, А. В. Иноземцев<sup>4</sup>

**Аннотация:** Для расчета энергии перестройки метиламинильных радикалов использованы энтальпии образования в газовой фазе соответствующих соединений и энтальпии образования аминильных радикалов. Специфика этих соединений заключается в том, что каждый радикал можно исследовать через производные водорода и через метилпроизводные, т. е. определить энергии перестройки радикалов через независимые энтальпии образования соединений в газовой фазе и определить средние значения. Полученные величины позволили определить энергии диссоциации связей и средние термодинамические энергии связей (C–H и C–N) в производных метиламинов.

**Ключевые слова:** энтальпии образования метиламинов; энтальпии образования радикалов; энергии перестройки радикалов; энергии диссоциации связей; средние термодинамические энергии связей

DOI: 10.30826/CE22150312

EDN: KUBXFX

### 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. Термохимия 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. Акад. наук, 2015. Т. 465. № 3. С. 325–328. doi: 10.1134/S0012501615110081.
5. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая химия / Пер. с англ. — М.: Мир, 2001. 532 с. (*Bader R. F. W. Atoms in molecules: A quantum theory.* — Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.)
6. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. — TRC data ser. — 1st ed. — CRC Press, 1994. 576 p.
7. CODATA key values for thermodynamics / Eds. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev. — New York, Washington, Philadelphia, London: Hemisphere Publishing Corp., 1989. 285 p.

Поступила в редакцию 17.05.2022

\* Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания, тема 0082-2019-0006 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоёмких материалов и разработка научных основ управления этими процессами». Номер государственной регистрации ААААА 21-121011990037-8.

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

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

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

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