

Оценка энтальпий образования свободных радикалов по кинетическим данным

© Туманов Владимир Евгеньевич⁺ и Денисов Евгений Тимофеевич*

Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432.

Московская обл. Россия. Факс: (496) 522-35-07. E-mail: tve@icp.ac.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: энтальпии образования свободного радикала, модель пересекающихся парабол, энтальпия образования молекулы, энергия диссоциации связи, константа скорости, реакция радикального отрыва, база данных в Интернет.

Аннотация

Предложен способ вычисления энтальпий образования свободных радикалов (R_i^\cdot) на основе модели пересекающихся парабол через энтальпию образования молекулы (R_iH), энергию диссоциации связи (D_{R-H}) и отношение констант скорости радикальных реакций отрыва ($X^\cdot + R_iH$, $X^\cdot + R_1H$). Предложенным способом по кинетическим данным вычислены энтальпии образования 111 свободных радикалов содержащих атомы С, Н, О, S. Представлено краткое описание базы данных по энтальпиям образования свободных радикалов, опубликованной в Интернет на портале Института проблем химической физики РАН.