

Термохимические свойства нитроалканов и их радикалов

© **Мирошниченко Евгений Александрович,^{*+} Конькова Татьяна Сергеевна, Матюшин Юрий Николаевич, Иноземцев Ярослав Олегович и Воробьева Вера Петровна**
*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.
Ул. Косыгина, 4. г. Москва, 119991. Факс: (495) 137-82-97. E-mail: eamir02@mail.ru*

^{*}Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: термохимические свойства, энергия диссоциации связи, невалентные взаимодействия, энтальпия образования радикала, энтальпия атомизации, энергия замещения, нитропроизводные алканов.

Аннотация

На основе экспериментальных измерений и литературных данных рекомендованы энтальпии сгорания и образования ряда нитроалканов в стандартном состоянии и в газовой фазе. Предложена методика расчета энергий диссоциации связей в нитроалканах на основе экспериментальных величин энтальпий атомизации и энергий невалентного взаимодействия нитрогрупп. Рассчитанные величины энергий диссоциации связей C-NO₂ сопоставлены с данными по кинетике термического распада. Энергии диссоциации связей C-NO₂ в нитроалкильных радикалах также предложено рассчитывать на основе энтальпий атомизации и энергий невалентного взаимодействия нитрогрупп. Определены закономерности изменения энергий диссоциации связей C-NO₂, C-C и C-H в нитроалканах и их радикалах.