

Влияние заместителей на энергию стабилизации углерод-центрированных и тио-центрированных радикалов

© 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: энергия стабилизации радикала, модель пересекающихся парабол, энергия диссоциации связи, углерод-центрированные радикалы, тио-центрированные радикалы, σ -радикалы, влияние заместителей.

Аннотация

По вычисленным значениям энергии диссоциации С-Н-связей в рамках модели пересекающихся парабол рассчитаны энергии стабилизации радикалов. Проведен сравнительный эмпирический анализ влияния заместителей на стабилизацию углерод-центрированных и тио-центрированных радикалов.