

## Энергия стабилизации кислородцентрированных радикалов

© Туманов<sup>+</sup> 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; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** энергия диссоциации связи, энергия стабилизации радикала, кислородцентрированные радикалы, алкоксильные радикалы, кабоксильные радикалы, пероксильные радикалы, феноксильные радикалы, нитроксильные радикалы, линейные корреляции.

### Аннотация

По вычисленным значениям энергий диссоциации O–H-связей рассчитаны энергии стабилизации кислородцентрированных радикалов. Проведен сравнительный эмпирический анализ влияния структуры молекулы на термическую стабилизацию кислородцентрированных радикалов. Проанализировано влияние заместителей на стабилизацию бензоилоксирадикалов и феноксильных радикалов. Получен ряд эмпирических корреляций, описывающих влияние структуры радикала и заместителей на стабилизацию кислородцентрированных радикалов.