

Энергия стабилизации ароматических аминильных радикалов

© Денисова⁺ Таиса Григорьевна и Денисов* Евгений Тимофеевич

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

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

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: аминильные радикалы, бензильный радикал, дифениламинильный радикал, корреляционное уравнение, феноксильный радикал, энергия диссоциации связи, энергия стабилизации радикала.

Аннотация

По энергиям диссоциации N–N-связей вычислены энергии стабилизации ароматических аминильных радикалов разной структуры. Установлены правила аддитивности для влияния заместителей на энергию стабилизации моно- и бис-замещенных дифениламинов и линейная корреляция между энергиями стабилизации фениламинильных и дифениламинильных радикалов. Проведено сравнение энергий стабилизации для аминильных, бензильных и феноксильных радикалов аналогичного строения. Установлена линейная корреляция между энергиями стабилизации аминильных ($\text{XC}_6\text{H}_4\text{N}^*\text{H}$) и феноксильных ($\text{XC}_6\text{H}_4\text{O}^*$) радикалов. Библиография – 17 ссылок.