

## **Энергия диссоциации С-Х (Х = F, Cl, Br, I) связей в галогензамещенных углеводородах: корреляционные соотношения с электроотрицательностью, силовыми постоянными связей и радиусами атомов Х**

© Туманов Владимир Евгеньевич

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

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

**Ключевые слова:** энергия диссоциации связи, энтальпия образования радикала, энтальпия образования молекулы, электроотрицательность, силовая постоянная связи, радиус атома, корреляционное уравнение, регрессионное уравнение.

### **Аннотация**

Вычислены или уточнены энергии диссоциации С-Х-связей (Х = F, Cl, Br, I) в галогензамещенных углеводородах по энтальпиям образования свободных радикалов, полученных из экспериментальных кинетических данных. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Установлена тесная корреляционная связь между энергией диссоциации С-Х-связи замещенных углеводородов с их электроотрицательностью, силовой постоянной и размером атома Х. Предложены регрессионные уравнения для различных групп галогензамещенных углеводородов в форме  $D_{C-X} = \omega_1 \sqrt{D_{X-X} D_{C-C}} + \omega_2 br_{XX} + \omega_3$ , где  $D_{F-F} = 158.670 \pm 0.096$  кДж/моль,  $D_{Cl-Cl} = 242.58 \pm 0.004$  кДж/моль,  $D_{Br-Br} = 193.859 \pm 0.120$  кДж/моль,  $D_{I-I} = 152.25 \pm 0.57$  кДж/моль,  $D_{C-C}$  рассчитаны по энтальпиям образования свободных радикалов.