

ТЕРМОХИМИЯ РЕАКЦИИ HO_2 (ИЛИГ. А. Поскрёбышев¹, М. Р. Кудашева², А. А. Поскрёбышев³

Аннотация: С помощью современных методов молекулярного моделирования показано, что реакции гидро- и метилпероксидных радикалов с одним из компонентов биомасел — p-бензилфенолом — являются экзотермичными. Как следствие, добавление p-бензилфенола в горючие смеси может приводить к его низкотемпературному цепному окислению, а значит к снижению времени и температуры воспламенения смесей.

Ключевые слова: p-бензилфенол; пероксидный радикал; энтальпия; перенос атома водорода

DOI: 10.30826/CE20130402

Литература

1. Czernik S., Bridgwater A. V. Overview of applications of biomass fast pyrolysis oil // *Energ. Fuel.*, 2004. Vol. 18. P. 590–598.
2. Poskrebyshv G. A., Wang H. Surrogate bio-oil // *Catalysis Center for Energy Innovation (CCEI) Spring Symposium.* — Newark, DE: University of Delaware, 2010.
3. Поскрёбышев Г. А. Химический состав модельного биомасла для расчета и оптимизации производства биотоплив // Тезисы конф. «Авиадвигатели XXI века». — М.: ЦИАМ, 2015. С. 1016–1017.
4. Поскрёбышев Г. А. Химический состав суррогатной смеси для анализа продуктов и оптимизации условий радиационно-химической переработки биомасел // VI Российская конф. «Актуальные проблемы химии высоких энергий»: сб. статей. — М.: Изд-во Граница, 2015. С. 296–298.
5. Bertholon G., Giray M., Perrin R., Vincent-Falquet-Berny M. F. Etude physicochimique des phenols. OX. — *Ethanlpies de combustion et energies de resonance des alcoyl et aryphenols* // *B. Soc. Chim. Fr.*, 1971. No. 532. P. 3180–3187.
6. Семёнов Н. Н. Цепные реакции. — М.: Госхимтехиздат, 1934. 555 с.
7. Титова Н. С., Торохов С. А., Старик А. М. О кинетических механизмах окисления n-декана // *Физика горения и взрыва*, 2011. Т. 47. № 2. С. 3–22.
8. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Petersson G. A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A. V., Bloino J., Janesko B. G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H. P., Ortiz J. V., Izmaylov A. F., Sonnenberg J. L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V. G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J. A., Jr., Peralta J. E., Ogliaro F., Bearpark M. J., Heyd J. J., Brothers E. N., Kudin K. N., Staroverov V. N., Keith T. A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A. P., Burant J. C., Iyengar S. S., Tomasi J., Cosci M., Millam J. M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J. W., Martin R. L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J. B., Fox D. J. Gaussian 16, Revision C.01. — Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc.,
9. Poskrebyshv G. A. The CDS values of $\Delta_f H_{298,15}^0$ and $S_{298,15}^0$ of the phenoxy radicals, formed by abstraction of H atom from the components of surrogate bio-oil // *Comput. Theor. Chem.*, 2019. Vol. 1169. No. 12625.
10. Poskrebyshv G. A. The standard thermochemical properties of the p-benzylphenol and dimethyl phthalate, and their temperature dependencies // *Comput. Theor. Chem.*, 2021. Vol. 1171. § 113146.
11. Поскрёбышев Г. А. Структура и термохимические свойства феноксильных радикалов, образованных из компонентов суррогата бионефти // *Горение и взрыв*, 2018. Т. 11. № 4. С. 14–22.
12. Goos E., Burcat A., Ruscic B. Extended Third Millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables. Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division, September 2005. Alexander Burcat and Branko Ruscic Report ANL 05/20 and TAE 960 Technion-IIT.

* Авторы благодарят Министерство высшего образования и науки Российской Федерации (AAAA-A20-120011390097-9 и AAAA-A20-120011390099-3) за поддержку представленных исследований.

¹ Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, gposkr@chph.ras.ru

² Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, kudashavamasha@bk.ru

³ Институт энергетических проблем химической физики им. В. Л. Тальрозе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, poskr@mail.ru

13. Afeefy H. Y., Liebman J. F., Stein S. E. Neutral thermochemical data in NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69 / Eds. P. J. Linstrom, W. G. Mallard. — Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2018. <http://webbook.nist.gov>.
14. Precomputed scaling factors. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database — SRD 101. III.B.3.a. <https://cccbdb.nist.gov/vibscalejust.asp>.
15. CRC Handbook of data on organic compounds / Eds. R. C. Weast, J. G. Grasselli. — 2nd ed. — Boca Raton, FL: CRC Press, Inc., 1989.

Поступила в редакцию 14.11.2020