

ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ НАФТАЛИНА*

Е. А. Мирошниченко¹, Т. С. Конькова², Ю. Н. Матюшин³, А. Б. Воробьев³,
Я. О. Иноземцев⁴, А. В. Иноземцев⁴

Аннотация: На основе метода двойной разности рассчитаны энтальпии образования радикалов нафтил-1 и нафтил-2 ($405,0 \pm 2,0$ кДж/моль). В качестве объектов исследования использованы данные по энтальпиям образования производных нафталина, в качестве реперных величин применили радикал фенил и производные бензола. Полученные данные по энтальпиям образования радикалов нафтил-1 и нафтил-2 были применены для корректировки имеющихся энтальпий образования производных нафталина в газовой фазе. Для 1- и 2-нитронафталина получена одинаковая величина, равная 133 кДж/моль. Литературные данные составляли $111,2 \pm 5,3$ и $145,0 \pm 1,9$ кДж/моль для 1-нитронафталина и 129,8 кДж/моль для 2-нитронафталина (расчет). Полученные данные позволили рассчитать энергии диссоциации связей $D(C-NO_2)$ в 1- и 2-нитронафталине, которая составила $306 \pm 2,0$ кДж/моль и близка к энергии этой связи в бензоле ($305,4 \pm 1,3$ кДж/моль). Для определения идентичности связей в нафталине и бензоле был выполнен совместный расчет связей C–H и C–C в нафталине и бензоле из энтальпий атомизации этих соединений. Связи получены идентичными, т. е. связи одинаковы по величине, из чего можно определить, что энергии перестройки радикалов нафтил-1 и нафтил-2 равны 0 кДж/моль.

Ключевые слова: энтальпия образования радикалов; метод двойной разности; ароматические гомологи; энтальпии образования производных 1- и 2-нафталинов; энергии перестройки радикалов; энергии диссоциации связей

DOI: 10.30826/CE21140211

Литература

1. Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш. Термохимия органических свободных радикалов. — М.: Наука, 2001. 304 с.
2. Luo Y. Comprehensive handbook of chemical bond energies. — Boca Raton — London — New York: CRC Press, 2007. 1655 p. doi: 10.1201/9781420007282.
3. Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С., Орлов Ю. Д., Берлин А. А. Энтальпия образования радикала 3-метилфуразанила-4 // Докл. Акад. наук, 2014. Т. 456. № 6. С. 673–675.
4. Мирошниченко Е. А., Орлов Ю. Д., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энергетические характеристики химических связей и перестройки радикалов // Докл. Акад. наук, 2015. Т. 465. № 3. С. 325–328. doi: 10.1134/S0012501615110081.
5. Мирошниченко Е. А., Пащенко Л. Л., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Берлин А. А. Энтальпии образования и перестройки ароматических радикалов // Изв. Акад. наук. Сер. хим., 2016. № 8. С. 1977–1980. doi: 10.1007/s11172-016-1539-0.
6. Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С., Орлов Ю. Д., Берлин А. А. Энергии перестройки радикалов азидонитроароматических соединений // Докл. Акад. наук, 2017. Т. 477. № 4. С. 429–432.
7. Мирошниченко Е. А., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Орлов Ю. Д., Пащенко Л. Л., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В. Энергии перестройки радикалов // Хим. физика, 2019. Т. 38. № 6. С. 3–8.
8. Stevens W. R., Ruscic B., Baer T. Heats of formation of $C_6H_5^\bullet$, $C_6H_5^+$, and C_6H_5NO by threshold photoelectron photoion coincidence and active thermochemical tables analysis // J. Phys. Chem. A, 2010. P. 13134–13145. doi: 10.1021/jp107561s.
9. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. — TRC data ser. — College Station, TX, USA: Thermodynamic Research Center Texas, 1994. Vol. 1. 807 p.
10. Yagofarov M. I., Nagrimanov R. N., Ziganshin M. A., Solomonov B. N. New aspects of relationship between the enthalpies of fusion of aromatic compounds at the melting temperatures and the enthalpies of solution in benzene at

* Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания, тема 0082-2019-0006 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами». Номер государственной регистрации ААААА21-121011990037-8.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm07@mail.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectrl@yandex.ru

- 298.15 K. Part I // *J. Chem. Thermodyn.*, 2018. Vol. 116. P. 152–158. doi: 10.1016/j.jct.2017.09.006.
11. *Nagrimanov R. N., Samatov A. A., Buzyurov A. V., Kurshhev A. G., Ziganshin M. A., Zaitsau D. H., Solomonov B. N.* Thermochemical properties of mono- and di-cyanoaromatic compounds at 298.15 K // *Thermochim. Acta*, 2018. Vol. 668. No. 10. P. 152–158. doi: 10.1016/j.tca.2018.07.026.
12. *Олейник Б. Н.* Точная калориметрия. — М.: Изд-во стандартов, 1973. 208 с.
13. *Ribeiro da Silva Manuel A. V., Amaral L. M. P. F., Santos A. F. L. O. M., Gomes J. R. B.* Thermochemistry of nitronaphthalenes and nitroanthracenes // *J. Chem. Thermodyn.*, 2006. Vol. 38. P. 748–755. doi: 10.1016/j.jct.2005.08.007.
14. *Suntsova M. A., Dorofeeva O. V.* Use of G4 theory for the assessment of inaccuracies in experimental enthalpies of formation of aromatic nitrocompounds // *J. Chem. Eng. Data*, 2016. No. 1. P. 313–329. doi: 10.1021/acs.jced.5b00558.
15. *Андреев К. К.* Термическое разложение и горение взрывчатых веществ. — Наука, 1966. 346 с.

Поступила в редакцию 14.05.2021