

УДК 544.332.2+544.18+547.024

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2020.4.5

ГОМОДЕСМОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ СВОБОДНЫХ РАДИКАЛОВ I. ПЕРВИЧНЫЕ АЛКИЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ

© Е. С. Ахметшина¹, А. И. Ахметьянова², А. С. Исмагилова², С. Л. Хурсан^{1*}¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН

Россия, Республика Башкортостан, 450054 г. Уфа, пр. Октября, 71.

²Башкирский государственный университет

Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

Тел.: +7 (347) 235 61 11.

*Email: khursansl@gmail.com

Проведен сравнительный анализ различных способов формирования полного набора гомодесмотических реакций (ГДР) для свободных радикалов с целью точного предсказания стандартных энтальпий образования радикалов. На примере первичных *n*-алкильных радикалов C_2-C_9 показано, что использование молекулярных структур в качестве референсных соединений в ГДР приводит к ее энергетическому дисбалансу до 10 кДж/моль. Величина эффекта уменьшается при увеличении размера референсных соединений. Наблюдаемый эффект предположительно отнесен к различию в изменении распределения электронной плотности в гомологических рядах *n*-алканов и первичных *n*-алкилов. Более предпочтительный способ конструирования ГДР для свободных радикалов состоит в использовании радикалов меньшего размера как референсных соединений. С помощью композитного метода G4 показано, что «идеальная» термонейтральная ГДР для первичных *n*-алкилов может быть получена при использовании в качестве сореагента ГДР радикала C_nH_{2n+1} , $n \geq 3$. С использованием *n*-пропильного радикала как сореагента сконструированы термонейтральные полные наборы ГДР для первичных *n*-алкильных радикалов C_3-C_9 и рассчитаны их стандартные энтальпии образования (кДж/моль): C_3H_{11} (56 ± 2), C_6H_{13} (34 ± 2), C_7H_{15} (12 ± 2), C_8H_{17} (-10 ± 2) и C_9H_{19} (-32 ± 2).

Ключевые слова: гомодесмотическая реакция, стандартная энтальпия образования, свободные радикалы.

Введение

Гомодесмотический метод исследования молекулярной энергетики органических соединений [1–3] характеризуется высокой точностью определения термодимических характеристик исследуемого соединения при условии сохранения максимального подобия референсных структур исследуемой в формальном уравнении гомодесмотической реакции (ГДР). С использованием авторской концепции полного набора ГДР, основанной на теоретико-графовом анализе строения исследуемого соединения и квантово-химическом расчете тепловых эффектов ГДР, нами были определены энтальпии образования $\Delta_f H^\circ$ органических соединений различных классов [4–5], энергии напряжения циклов [6–8] для моно- и бициклических соединений тестового набора из 65 структур. Важным условием корректного выбора ГДР является выполнение ряда балансов: материального, связевого, группового и т.д. [9].

В настоящей работе рассмотрены особенности применения гомодесмотической концепции к определению термодимических характеристик свободных радикалов. В дополнение к упомянутым балансам ГДР принципиально важным для радикалов является выполнение еще одного баланса – изогрического, т.е. баланса по количеству неспаренных

электронов и неподеленных электронных пар. В связи с этим встает вопрос: каким должен быть предпочтительный вид гомодесмотической реакции, пригодной для надежного определения энтальпии образования свободного радикала? Ответу на этот вопрос посвящена настоящая работа, в качестве объектов исследования выбраны первичные алкильные радикалы нормального строения как наиболее простые представители радикальных соединений.

Обсуждение результатов

Спецификой свободного радикала является наличие радикального центра – атома или группы атомов, на которых локализован неспаренный электрон. Например, в аллильном радикале $H_2C-CH-CH_2$ спиновая плотность распределена симметрично так, что терминальные атомы углерода являются эквивалентными. В насыщенных системах делокализация неспаренного электрона проявляется в меньшей степени, тем не менее, его влияние существенно не только для первичного окружения радикального центра. Так, в методе Орлова и Лебедева [10] влияние свободной валентности на энтальпию образования соседних термодимических групп учитывается вплоть до γ -атома включительно.

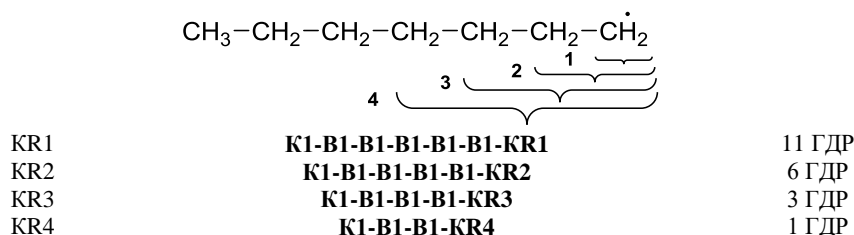


Рис. 1. Различные способы представления радикальной концевой группы KR в первичном *n*-гептильном радикале для учета взаимодействия неспаренного электрона с соседними термодимическими группами.

Таблица 1

Абсолютные стандартные энтальпии (H_{298}° , Хартри), рассчитанные с помощью композитного метода G4 и стандартные энтальпии образования ($\Delta_f H^{\circ}$, кДж/моль) *n*-алканов и первичных *n*-алкильных радикалов

Молекула	H_{298}°	$\Delta_f H^{\circ}$ [11]	Радикал	H_{298}°	$\Delta_f H^{\circ}$ [12]
C ₂ H ₆	-79.733661	-84.0	C ₂ H ₅	-79.074155	118.8±1.3
C ₃ H ₈	-119.010256	-104.7	C ₃ H ₇	-118.350041	100±2
C ₄ H ₁₀	-158.287099	-125.6	C ₄ H ₉	-157.627629	77.8±2.1
C ₅ H ₁₂	-197.563944	-146.8	C ₅ H ₁₁	-196.905083	(54.4)
C ₆ H ₁₄	-236.840900	-167.1	C ₆ H ₁₃	-236.182469	(33.5)
C ₇ H ₁₆	-276.117759	-187.8	C ₇ H ₁₅	-275.460032	-
C ₈ H ₁₈	-315.394736	-208.7	C ₈ H ₁₇	-314.737476	-
-	-	-	C ₉ H ₁₉	-354.015086	-

Таблица 2

Гомодесмотические реакции и соответствующие тепловые эффекты ГДР ($\Delta_r H^{\circ}$, кДж/моль) для различных способов представления радикальной концевой группы (на примере первичного *n*-гептильного радикала)

№	ГДР	$\Delta_r H^{\circ}$
	KR = CH ₂ *	
1	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₆ → C ₃ H ₇ + C ₆ H ₁₄	7.2
2	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₆ → C ₃ H ₇ + 2 C ₄ H ₁₀	8.2
3	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₆ → C ₃ H ₇ + C ₃ H ₈ + C ₃ H ₁₂	8.2
4	C ₇ H ₁₅ + 3 C ₂ H ₆ → C ₃ H ₇ + 2 C ₃ H ₈ + C ₄ H ₁₀	8.8
5	C ₇ H ₁₅ + 4 C ₂ H ₆ → C ₃ H ₇ + 4 C ₃ H ₈	9.5
	KR = CH ₂ CH ₂ *	
6	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₆ → C ₄ H ₉ + C ₅ H ₁₂	5.6
7	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₆ → C ₄ H ₉ + C ₃ H ₈ + C ₄ H ₁₀	6.2
8	C ₇ H ₁₅ + 3 C ₂ H ₆ → C ₄ H ₉ + 3 C ₃ H ₈	6.9
	KR = CH ₂ CH ₂ CH ₂ *	
9	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₆ → C ₅ H ₁₁ + C ₄ H ₁₀	4.0
10	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₆ → C ₅ H ₁₁ + 2 C ₃ H ₈	4.6
	KR = CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂	
11	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₆ → C ₆ H ₁₃ + C ₃ H ₈	2.5

*Полный набор ГДР для данного представления включает все нижеприведенные реакции.

В связи с вышеизложенным возникает неопределенность при написании графа свободного радикала. В рамках используемого нами подхода концевая радикальная группа в *n*-алкильном радикале может быть представлена различным образом

(рис. 1) в зависимости от учитываемого дальнего действия неспаренного электрона с соседними атомами. Соответственно форме представления радикальной концевой группы KR будет изменяться полный набор ГДР. Мы рассмотрели несколько

вариантов вида KR и вычислили тепловые эффекты ГДР. Первичные данные – абсолютные энтальпии n -алканов и первичных n -алкильных радикалов – рассчитаны с помощью композитного метода G4 (табл. 1). Результаты расчета тепловых эффектов ГДР $\Delta_r H^\circ$ приведены в табл. 2 на примере первичного n -гептильного радикала.

Анализ данных табл. 2 позволяет сделать ряд выводов. Во-первых, несмотря на простоту объекта исследования, ни одна из использованных ГДР не является «идеальной» [9], т.е. термонейтральной реакцией. Во-вторых, увеличение размера концевой группы KR в целом улучшает ситуацию, уменьшая $\Delta_r H^\circ$. Тем не менее, тепловые эффекты ГДР для свободных радикалов (табл. 2) довольно заметно отличаются друг от друга и этим демонстрируют явное отличие от $\Delta_r H^\circ$ для ациклических органических соединений [4]. Как показано ранее [9], подбор идеальной термонейтральной ГДР позволяет существенно снизить уровень теории квантово-химического расчета без потери точности определения $\Delta_r H^\circ$ исследуемого соединения. Термонейтральные ГДР для ациклических органических соединений [4] позволили с одинаковой эффективностью использовать не только высокоуровневые и затратные композитные расчеты (G3), но и более экономичные и простые уровни теории – M06-2X/cc-pVTZ и B3LYP/6-31G(d).

Наблюдаемая закономерность изменения $\Delta_r H^\circ$ (табл. 2) может быть объяснена следующим образом. Очевидно, что в гомологическом ряду n -алканов $C_n H_{2n+2}$ и n -алкилов $C_n H_{2n+1}$, где n – большое число, увеличение n на единицу должно изменять

энтальпию молекулы и радикала на одну и ту же величину. Однако, в ряду изученных соединений это не так. Зависимость абсолютной энтальпии H°_{298} от числа атомов углерода n (табл. 1) имеет чуть различающийся наклон для n -алканов C_4 – C_9 (–39.277508 Хартри) и соответствующих первичных n -алкильных радикалов (–39.276896 Хартри). Разница этих величин (1.6 кДж/моль) отражает известный факт слабого уменьшения прочности первичной связи C–H в алканах при переходе от низших к высшим представителям гомологического ряда [12]. Другими словами, использование молекул в качестве референсных соединений в гомодесмотических реакциях для радикальных структур сопряжено с внесением энергетического дисбаланса за счет затухающего взаимодействия неспаренного электрона с соседними группами.

Формулировка последнего вывода содержит в себе и ответ на решение проблемы указанного дисбаланса: в качестве референсных структур для свободных радикалов целесообразнее использовать другие свободные радикалы. При этом возникает аналогичный рассмотренному выше вопрос: какова структура наименьшего референсного соединения для конструирования идеальной ГДР? На примере n -гептильного радикала мы рассмотрели различные варианты (табл. 3). Видно, что этильный радикал C_2H_5 не позволяет достичь желаемого эффекта, тогда как, начиная с n -пропильного радикала, все формальные реакции становятся практически термонейтральными: $\Delta_r H^\circ < 1$ кДж/моль по абсолютной величине!

Таблица 3

Гомодесмотические реакции и соответствующие тепловые эффекты ГДР ($\Delta_r H^\circ$, кДж/моль) для различных способов представления радикального сореагента (на примере первичного n -гептильного радикала)

№	ГДР	$\Delta_r H^\circ$
CH ₃ CH ₂		
1	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₅ → C ₃ H ₇ + C ₆ H ₁₃	4.4
2	C ₇ H ₁₅ + C ₂ H ₅ → C ₄ H ₉ + C ₅ H ₁₁	3.9
3	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₅ → 2 C ₃ H ₇ + C ₅ H ₁₁	8.3
4	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₂ H ₅ → C ₃ H ₇ + 2 C ₄ H ₉	8.0
5	C ₇ H ₁₅ + 3 C ₂ H ₅ → 3 C ₃ H ₇ + C ₄ H ₉	12.5
6	C ₇ H ₁₅ + 4 C ₂ H ₅ → 5 C ₃ H ₇	16.9
CH ₃ CH ₂ CH ₂		
1	C ₇ H ₁₅ + C ₃ H ₇ → C ₄ H ₉ + C ₆ H ₁₃	–0.2
2	C ₇ H ₁₅ + C ₃ H ₇ → 2 C ₅ H ₁₁	–0.1
3	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₃ H ₇ → 2 C ₄ H ₉ + C ₅ H ₁₁	–0.6
4	C ₇ H ₁₅ + 3 C ₃ H ₇ → 4 C ₄ H ₉	–0.9
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂		
1	C ₇ H ₁₅ + C ₄ H ₉ → C ₅ H ₁₁ + C ₆ H ₁₃	0.3
2	C ₇ H ₁₅ + 2 C ₄ H ₉ → 3 C ₅ H ₁₁	0.1
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂		
1	C ₇ H ₁₅ + C ₅ H ₁₁ → 2 C ₆ H ₁₃	0.5

Гомодесмотические реакции, соответствующие тепловые эффекты ГДР ($\Delta_r H^\circ$, кДж/моль) и расчет стандартных энтальпий образования ($\Delta_f H^\circ$, кДж/моль) первичных *n*-алкильных радикалов

№	ГДР	$\Delta_r H^\circ$	$\Delta_f H^\circ$
C₅H₁₁			
1	$C_5H_{11} + C_3H_7 \rightarrow 2 C_4H_9$	-0.4	56.0
C₆H₁₃			
1	$C_6H_{13} + C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + C_5H_{11}$	-0.5	34.3
2	$C_6H_{13} + 2 C_3H_7 \rightarrow 3 C_4H_9$	-0.9	34.3
	Среднее		34.3 ± 0.0
C₇H₁₅			
1	$C_7H_{15} + C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + C_6H_{13}$	-0.2	12.2
2	$C_7H_{15} + C_3H_7 \rightarrow 2 C_5H_{11}$	-0.1	12.2
3	$C_7H_{15} + 2 C_3H_7 \rightarrow 2 C_4H_9 + C_5H_{11}$	-0.6	12.2
4	$C_7H_{15} + 3 C_3H_7 \rightarrow 4 C_4H_9$	-0.9	12.1
	Среднее		12.2 ± 0.0
C₈H₁₇			
1	$C_8H_{17} + C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + C_7H_{15}$	-0.4	-9.6
2	$C_8H_{17} + C_3H_7 \rightarrow C_5H_{11} + C_6H_{13}$	-0.1	-9.6
3	$C_8H_{17} + 2 C_3H_7 \rightarrow 2 C_4H_9 + C_6H_{13}$	-0.4	-9.7
4	$C_8H_{17} + 2 C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + 2 C_5H_{11}$	-0.6	-9.6
5	$C_8H_{17} + 3 C_3H_7 \rightarrow 3 C_4H_9 + C_5H_{11}$	-1.0	-9.6
6	$C_8H_{17} + 4 C_3H_7 \rightarrow 5 C_4H_9$	-1.3	-9.7
	Среднее		-9.6 ± 0.0
C₉H₁₉			
1	$C_9H_{19} + C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + C_8H_{17}$	0.1	-31.8
2	$C_9H_{19} + C_3H_7 \rightarrow C_5H_{11} + C_7H_{15}$	0.0	-31.8
3	$C_9H_{19} + C_3H_7 \rightarrow 2 C_6H_{13}$	0.5	-31.4
4	$C_9H_{19} + 2 C_3H_7 \rightarrow 2 C_4H_9 + C_7H_{15}$	-0.3	-32.2
5	$C_9H_{19} + 2 C_3H_7 \rightarrow C_4H_9 + C_5H_{11} + C_6H_{13}$	-0.0	-31.9
6	$C_9H_{19} + 2 C_3H_7 \rightarrow 3 C_5H_{11}$	-0.2	-32.0
7	$C_9H_{19} + 3 C_3H_7 \rightarrow 3 C_4H_9 + C_6H_{13}$	-0.4	-32.3
8	$C_9H_{19} + 3 C_3H_7 \rightarrow 2 C_4H_9 + 2 C_5H_{11}$	-0.6	-32.4
9	$C_9H_{19} + 4 C_3H_7 \rightarrow 4 C_4H_9 + C_5H_{11}$	-0.9	-32.8
10	$C_9H_{19} + 5 C_3H_7 \rightarrow 6 C_4H_9$	-1.3	-33.2
	Среднее		-32.2 ± 0.5

Использование *n*-C₃H₇ в качестве сореагента означает, что в правых частях идеальных ГДР для радикалов присутствуют структуры, в которых радикальный центра связан, как минимум, с двумя соседними внутренними группами, что соответствует КРЗ (рис. 1). Следовательно, идеальные ГДР для первичных *n*-алкильных радикалов можно получить, начиная с *n*-пентила. В таблице 4 представлены результаты расчета $\Delta_r H^\circ$ всех ГДР для радикалов C₅–C₉, а также вычисленные из этих данных стандартные энтальпии образования свободных радикалов. Отметим, что литературные величины $\Delta_f H^\circ$ для *n*-C₅H₁₁ (54.4 кДж/моль) и *n*-C₆H₁₃ (33.5

кДж/моль), приведенные в [12], в пределах погрешности определения энтальпий образования референсных радикалов (± 2 кДж/моль, табл. 1) совпадают с рассчитанными. Следует также отметить, что расчет $\Delta_f H^\circ$ по полному набору ГДР дает практически совпадающие значения энтальпий образования: стандартное отклонение $\Delta \Delta_f H^\circ$ для радикалов C₆–C₈ меньше 0.1 кДж/моль, а для *n*-C₉H₁₉ составляет всего 0.5 кДж/моль!

Выводы

Таким образом, в настоящей работе с помощью авторской гомодесмической методологии оп-

ределены энтальпии образования первичных *n*-алкильных радикалов C₅–C₉ (кДж/моль): C₅H₁₁ (56±2), C₆H₁₃ (34±2), C₇H₁₅ (12±2), C₈H₁₇ (–10±2) и C₉H₁₉ (–32±2). С методической точки зрения конструирование формальных гомодесмотических реакций для свободных радикалов целесообразно проводить с использованием радикальных структур в качестве референсных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №18-07-00584 А, а также в рамках Государственного задания по теме НИР УфИХ УФИЦ РАН АААА-А20-120012090030-6. Все квантово-химические вычисления проводили на оборудовании центра коллективного пользования «Химия» Уфимского института химии УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель» УФИЦ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. George P., Trachtman M., Bock C. W., Brett A. M. An alternative approach to the problem of assessing stabilization energies in cyclic conjugated hydrocarbons // *Theoretica Chimica Acta*. 1975. V. 38. Pp. 121–129.
2. Bachrach S. M. *Journal of Chemical Education*. The group equivalent reaction: An improved method for determining ring strain energy // 1990. V. 67. No. 11. Pp. 907–908.
3. Wheeler S. E., Houk K. N., Schleyer P. v. R., Allen W. D. A hierarchy of homodesmotic reactions for thermochemistry // *Journal of American Chemical Society*. 2009. V. 137. Pp. 2547–2560.
4. Хурсан С. Л., Исмагилова А. С., Ахмеров А. А., Спивак С. И. Конструирование гомодесмотических реакций для расчета энтальпий образования органических соединений // *Журнал физической химии*. 2016. Т. 90. №4. С. 569–575.
5. Хурсан С. Л., Исмагилова А. С., Спивак С. И. Теоретико-графовый метод определения базиса гомодесмотических реакций для ациклических химических соединений // *Доклады АН*. 2017. Т. 474. №4. С. 454–457.
6. Бурцева Е. С., Ахметьянова А. И., Исмагилова А. С., Хурсан С. Л. Гомодесмотический метод определения невалентных эффектов в ряду производных циклопропана // *Вестник БашГУ*. 2017. Т. 22. №4. С. 946–952.
7. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. Complete set of homodesmotic reactions for the analysis of non-valence effects in the three-to-six-membered cyclic organic compounds // *Thermochemica Acta*. 2020. V. 685. 178541.
8. Ахметшина Е. С., Хурсан С. Л. Использование формализма реакций разделения групп для анализа невалентных эффектов органических соединений: трехчленные углеродные циклы // *Известия АН. Сер. химическая*. 2020. №1. С. 76–83.
9. Хурсан С. Л. Сопоставительный анализ теоретических методов определения термодинамических характеристик органических соединений // *Вестник БашГУ*. 2014. Т. 19. №2. С. 395–401.
10. Орлов Ю. Д., Лебедев Ю. А., Сайфуллин И. Ш. *Термохимия органических свободных радикалов*. М.: Наука, 2001. 304 с.
11. 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 and W. G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. URL: <https://doi.org/10.18434/T4D303>, (retrieved October 18, 2020).
12. Luo Y-R. *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies*. CRC Press. Boca Raton. 2007.

Поступила в редакцию 22.10.2020 г.

**HOMODESMOTIC METHOD FOR THE DETERMINATION
OF ENTHALPIES OF FORMATION OF FREE RADICALS.
I. PRIMARY ALKYL RADICALS**

© E. S. Akhmetshina¹, A. I. Akhmetyanova², A. S. Ismagilova², S. L. Khursan^{1*}

¹*Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of RAS
71 Oktyabrya Avenue, 450054 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

²*Bashkir State University
32 Zaki Validi Street, 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7 (347) 235 61 11.

**Email: khursansl@gmail.com*

A comparative analysis of various methods for the design of a complete set of homodesmotic reactions (HDR) for free radicals was performed in order to predict with high accuracy the standard enthalpies of formation of radicals. Applying the test set of primary n-alkyl radicals C₂ ÷ C₉, it was shown that the use of molecular structures as reference compounds in homodesmotic reactions leads to the reaction energetics imbalance up to 10 kJ/mol. The magnitude of the effect decreases as the size of the reference compounds increases. The observed effect is tentatively assigned to the difference in the change of electron density distribution in the homologous series of n-alkanes and primary n-alkyls. A more preferred method for constructing homodesmotic reactions for free radicals is to use smaller radicals as reference compounds. Using the composite G4 method, it was shown that “ideal” thermoneutral homodesmotic reactions for primary n-alkyls can be obtained by applying C_nH_{2n+1}, n ≥ 3 radical as a HDR coreagent. Therefore, the thermoneutral complete sets of homodesmotic reactions for primary n-alkyl radicals C₅ ÷ C₉ were constructed using the n-propyl radical as a coreagent, and the free radical standard enthalpies of formation (kJ/mol) were calculated: C₅H₁₁ (56 ± 2), C₆H₁₃ (34 ± 2), C₇H₁₅ (12 ± 2), C₈H₁₇ (–10 ± 2) и C₉H₁₉ (–32 ± 2). The reproducibility of the estimation for enthalpy of formation within a complete set of homodesmotic reactions is quite excellent: the standard deviation for the C₉H₁₉ radical was found to be 0.5 kJ/mol (ten independent estimations) and is much less for the rest of the radicals. For this reason, the total uncertainty in calculating the enthalpies of formation of the examined radicals was accepted as equal to that of the reference n-propyl and n-butyl radicals.

Keywords: homodesmotic reaction, standard enthalpy of formation, free radicals.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. George P., Trachtman M., Bock C. W., Brett A. M. *Theoretica Chimica Acta*. 1975. Vol. 38. Pp. 121–129.
2. Bachrach S. M. 1990. Vol. 67. No. 11. Pp. 907–908.
3. Wheeler S. E., Houk K. N., Schleyer P. v. R., Allen W. D. *Journal of American Chemical Society*. 2009. Vol. 137. Pp. 2547–2560.
4. Khursan S. L., Ismagilova A. S., Akhmerov A. A., Spivak S. I. *Zhurnal fizicheskoi khimii*. 2016. Vol. 90. No. 4. Pp. 569–575.
5. Khursan S. L., Ismagilova A. S., Spivak S. I. *Doklady AN*. 2017. Vol. 474. No. 4. Pp. 454–457.
6. Burtseva E. S., Akhmet'yanova A. I., Ismagilova A. S., Khursan S. L. *Vestnik BashGU*. 2017. Vol. 22. No. 4. Pp. 946–952.
7. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. *Thermochemica Acta*. 2020. Vol. 685. 178541.
8. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. *Izvestiya AN. Ser. khimicheskaya*. 2020. No. 1. Pp. 76–83.
9. Khursan S. L. *Vestnik BashGU*. 2014. Vol. 19. No. 2. Pp. 395–401.
10. Orlov Yu. D., Lebedev Yu. A., Saifullin I. Sh. *Termokhimiya organicheskikh svobodnykh radikalov* [Thermochemistry of organic free radicals]. Moscow: Nauka, 2001.
11. Afeefy H. Y., Liebman J. F., Stein S. E. *Neutral Thermochemical Data*. NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69. Ed. P. J. Linstrom and W. G. Mallard, National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg MD, 20899. URL: <https://doi.org/10.18434/T4D303>, (retrieved October 18, 2020).
12. Luo Y-R. *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies*. CRC Press. Boca Raton. 2007.

Received 22.10.2020.