

Приложение 1.

Фундаментальные постоянные

Скорость света в вакууме	c	299 792 458 м·с ⁻¹
Постоянная Авогадро	N_A	6,0220·10 ²³ моль ⁻¹
Постоянная Фарадея	F	96484 Кл·моль ⁻¹
Универсальная газовая постоянная	R	8,31441 Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹
Постоянная Больцмана	$k=R/ N_A$	1,3806·10 ⁻²³ Дж·К ⁻¹
Магнитная постоянная	μ_0	4 π ·10 ⁻⁷ Г·м ⁻¹ = 1,2566·10 ⁻⁶ Г·м ⁻¹
Электрическая постоянная	$\epsilon_0=(\mu_0c^2)^{-1}$	8,8542 10 ⁻¹² Ф·м ⁻¹
Постоянная Планка	h	6,6262·10 ⁻³⁴ Дж·Гц ⁻¹
	$\hbar = h/2\pi$	1,05459·10 ⁻³⁴ Дж·с
Атомная единица массы	а.е.м.	1,6606·10 ⁻²⁷ кг
Масса покоя электрона	m_e	9,1095·10 ⁻³¹ кг
		5,4858·10 ⁻⁴ а.е.м.
Масса покоя протона	m_p	1,6727·10 ⁻²⁷ кг
		1,0072а.е.м.
Масса покоя нейтрона	m_n	1,6749·10 ⁻²⁷ кг
		1,0087а.е.м.
Элементарный заряд	e	1,6022·10 ⁻¹⁹ Кл
Радиус Бора	a_0	0,5292·10 ⁻¹⁰ м
Магнетон Бора	$\mu_B=eh/4\pi m_e$	9,2741·10 ⁻²⁴ Дж·Т ⁻¹
Ядерный магнетон	$\mu_N=eh/4\pi m_p$	5,0508·10 ⁻²⁷ Дж·Т ⁻¹
Магнитный момент протона в магнетонах Бора	μ_p/μ_B	0,001521
	μ_p/μ_N	2,7928
Магнитный момент протона в ядерных магнетонах		
g-фактор свободного электрона	g_e	2,002322
g-фактор протона	g_p	5,585486

Приложение 2.
Кристаллические ионные радиусы.

Элемент	Заряд	Радиус, А	Элемент	Заряд	Радиус, А
Ag	+1	1,26	K	+1	1,33
Al	+3	0,50	Li	+1	0,68
Au	+1	1,37	Mg	+2	0,66
	+3	0,85	Mn	+2	0,80
Ba	+2	1,34		+4	0,60
Be	+2	0,35	Na	+1	0,97
Br	-1	1,96	Ni	+2	0,69
Ca	+2	0,99	NH ₃	+1	1,43
Cl	-1	1,81	O	+6	0,09
Co	+2	0,72		-2	1,32
	+3	0,63	Pb	+2	1,20
Cr	+2	0,89	Pt	+2	0,80
	+3	0,63		+4	0,65
Cr	+6	0,52	Rb	+1	1,47
Cs	+1	1,67	S	-2	1,84
Cu	+1	0,96		+2	2,19
	+2	0,72	Sn	+2	0,93
F	-1	1,33		+4	0,71
Fe	+2	0,74	Sr	+2	1,12
	+3	0,64	Ti	+4	0,68
I	-1	2,20	Zn	+2	0,74

Приложение 3.
 Длины химических связей, А.

Связь	Тип, соединение	Длина	Связь	Тип, соединение	Длина
C-C	одинарная	1,541	C-O-	одинарная	1,43
	двойная	1,337		карбонил	1,23
	тройная	1,206	C-S	одинарная	1,81
C-H	парафин	1,091		двойная	1,71
	непредельное	1,07	C-Cl	1,759	
	ароматическое	1,084	C-F	1,378	
C-N	одинарная	1,479	N≡N	1,0975	
	тройная	1,158	H-NH ₃	1,008	
	пиридин	1,352	H-OCH ₃	1,096	

Приложение 4.

Энергии связи в двухатомных молекулах D_{298} , кДж/моль.

H ₂	435,99	Cl ₂	242,6
HF	570,3	Br ₂	192,8
HCl	431,6	I ₂	151,1
HBr	366,4	O ₂	498,4
HI	298,4	N ₂	945,3
F ₂	158,8	CO	1075

Энергии связи в многоатомных молекулах D_{298} , кДж/моль.

H-CH ₃	438,4	H-NHCH ₃	418,4
H-C ₂ H ₅	419,5	H-N(CH ₃) ₂	382,8
H-C ₆ H ₅	464,0	H-NHC ₆ H ₅	368,2
H-OH	498	CH ₃ -CH ₃	376,1
H-OCH ₃	436,8	CH ₂ =CH ₂	720
H-OC ₆ H ₅	361,9	CH≡CH	962
H-O ₂ H	369	Cl-CCl ₃	305,9
H-OCOCH ₃	442,7	Br-CH ₃	292,9
H-NH ₃	449,4	F-CH ₃	452

Примечание 1. Энергия связи может несколько отличаться от энергии диссоциации.

Примечание 2. Энергия связи при 0 К D_0 может быть оценена по формуле $D_{298} = D_0 + (3/2)RT$

Приложение 5.

Частоты колебаний в некоторых молекулах, см⁻¹.

H ₂	4396,6	N ₂	2359,4	NO ₂ , ν_3	1664
F ₂	924	O ₂	1579,8	CO ₂ , ν_1	1388
Cl ₂	564,9	NO	1916	ν_2	667(2)
Br ₂	323,2	CO	2169	ν_3	2349
I ₂	214,2	H ₂ O, ν_1	3657	R ₃ C-H	2900-3300
HF	4139,0	ν_2	1595	-C=C-	1650-1700
HCl	2989,7	ν_3	3756	-C≡C-	2100-2300
HBr	2649,6	NO ₂ , ν_1	1356	R ₂ C=O	1650-1750
HI	2309,5	ν_2	757		

Приложение 6.

Значения параметров функции Морзе для некоторых связей.

СВЯЗЬ	D ₀ , кДж/моль	r ₀ , А	β, А ⁻¹
H-H	457	0,74	1,94
C-H	441	1,09	1,78
O-H	479	0,96	2,22
F-H	587	0,92	2,23
Cl-H	444	1,27	1,87
Br-H	378	1,41	1,81
I-H	309	1,61	1,75
C-C	353	1,54	1,94
C-F	447	1,38	2,00
C-Cl	334	1,76	1,81
C-Br	280	1,91	1,81
C-I	242	2,10	1,81
C-O	357	1,43	2,05

Приложение 7.
 Константы скорости некоторых реакций.

Реакция	Среда	Предэкспонент	E_A , кДж/моль
$\text{CH}_3\text{Cl} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{Cl}$	газ	$2 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$	356,2
$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{CH}_3$	газ	$3 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$	360
цис- $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3 \rightarrow$ транс- $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_3$	газ	$6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$	264
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl}$	газ	$3 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$	237
$\text{CH}_3\text{ONO} \rightarrow \text{CH}_3\text{O}\cdot + \text{NO}$	газ	$1,3 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$	151
$\text{N}_2\text{O}_4 \rightarrow 2\text{NO}_2$	газ	10^{16} с^{-1}	54,4
$[(\text{CH}_3)_2(\text{CN})\text{CN}]_2 \rightarrow$ $2(\text{CH}_3)_2(\text{CN})\text{C}\cdot + \text{N}_2$	C_6H_6	10^{15} с^{-1}	127
$(\text{C}_6\text{H}_5\text{COO})_2 \rightarrow$ $2\text{C}_6\text{H}_5\text{COO}\cdot$	C_6H_6	$3 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$	129
$\text{H}\cdot + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3\cdot$	газ	$3 \cdot 10^{10} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	27,6
$\text{H}\cdot + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\cdot$	газ	$3,2 \cdot 10^{13} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	17,2
		1	
$\text{CH}_3\cdot + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}\cdot$	газ	$5 \cdot 10^8 \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	41
$\text{Cl} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{H}\cdot$	газ	$9,5 \cdot 10^{13} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	23
		1	
$\text{CH}_3\text{Br} + \text{I}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{I} + \text{Br}^-$	H_2O	$1,7 \cdot 10^{13} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	76,6
		1	
$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 + \text{OH}^- \rightarrow$ $\text{CH}_3\text{COO}^- + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	H_2O	$1,4 \cdot 10^{10} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	46,9
		1	
Продолжение цепи при полимеризации стирола		$1 \cdot 10^7 \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	30,6
Продолжение цепи при полимеризации метилметакрилата		$1,3 \cdot 10^8 \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	19,7
Перенос электрона			
$\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+}$	H_2O	$5 \cdot 10^8 \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	46,5
$\text{MnO}_4^- + \text{MnO}_4^{2-}$	H_2O	$1,5 \cdot 10^{11} \text{ л/моль}\cdot\text{с}^{-1}$	43,5
		1	

*Лекции по теории элементарного акта химических реакций в конденсированной фазе
для студентов 4-го курса Химического факультета МГУ им. Ломоносова,
проф. А.Х. Воробьев*



Приложение 8.

Справочная литература.

- 1.. "Краткий справочник физико-химических величин", Изд. 8е. Под ред. А.А.Равдель, А.М.Пономаревой, "Химия", Л-д, 1983, 232 с.
2. "Handbook of Chemistry and Physics" Изд. 69е, под ред. R.C.Weast, CRC Press Inc., Florida, 1988-1989г.
3. "Энергии разрыва химических связей. Потенциалы тонизации и сродство к электрону" Л.В.Гурвич, Г.В.Карачевцев, В.Н.Кондратьев, Ю.А.Лебедев, В.А.Медведев, В.К.Потапов, Ю.С.Ходеев.М.,Наука, 1974, 351 с.
4. "Молекулярные постоянные неорганических соединений. Справочник" Под ред К.С Краснова. Л-д.Химия, 1979, 448 с.
5. Денисов Е.Т. "Кинетика гомогенных химических реакций" М.: Высшая школа, 1978, 367 с. (1988 2-е издание).
6. Денисов Е.Т. "Константы скорости гомогенных жидкофазных реакций " М.: Наука, 1971, 711 с..
7. Kerr J.A., Parsonage M.J."Evaluated kinetic data on gas phase addition reaction" London, Butterworth Group, 1972, 384 p.