
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

Зауэр Е.А.

Волгоградский государственный технический университет,
г. Волгоград

Зауэр Е.А.
Волгоградский
государственный
технический университет

Квантово-химические методы расчета широко используются для определения энтальпий образования соединений разных классов.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов выполнен расчет энтальпий образования полициклических ароматических углеводородов в конденсированном состоянии.

Для выбора метода квантово-химического расчета с помощью программы МОРАС, в которую входят методы PM3, MINDO, AM1 и MNDO, были выполнены полная оптимизация геометрии и рассчитаны энтальпии образования около 50 полициклических ароматических углеводородов с известными экспериментальными значениями энтальпий образования в конденсированном состоянии.

Сравнение экспериментальных и расчетных значений показало, что наилучшая корреляционная связь наблюдается при использовании метода PM3. Она хорошо описывается уравнением линейной регрессии, которое было использовано для прогнозирования энтальпий образования в конденсированном состоянии около 60 полициклических ароматических углеводородов.