

---

## РАСЧЕТ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК АЛКИЛПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА

Зауэр Е.А.

Волгоградский государственный технический университет, г. Волгоград

Зауэр Е.А.  
Волгоградский  
государственный  
технический университет

Экспериментальное определение энтальпий образования органических соединений достаточно трудоемко, а зачастую и невозможно. Поэтому в последнее время все большее значение приобретают расчетные квантово-химические методы, реализуемые с помощью специальных компьютерных комплексов и программ.

В данной работе выполнен расчет энтальпий образования алкилпроизводных адамантана с помощью программы MOPAC, в которую входят полуэмпирические квантово-химические методы PM3, MINDO, AM1 и MNDO. Выбор в качестве объекта расчета адамантана и его производных обусловлен их широким применением как в синтезе лекарственных препаратов, так и в получении новых полимерных материалов.

Для выбора метода квантово-химического расчета энтальпий образования алкилпроизводных адамантана были использованы вещества, для которых известны экспериментальные значения энтальпий образования. Для каждого из этих веществ были выполнены полная оптимизация геометрии молекул и расчет их энтальпий образования методами PM3, MINDO, AM1 и MNDO.

Наибольшая корреляционная связь между экспериментальными и расчетными значениями наблюдается при использовании методов PM3 и AM1.