
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Зауэр Е.А.

Волгоградский государственный технический университет

Зауэр Е.А.
Волгоградский
государственный
технический университет

Квантово-химические методы расчета широко используются для определения энтальпий образования соединений разных классов. Они особенно удобны для расчетов больших молекул.

В данной работе с помощью полуэмпирических квантово-химических методов выполнен расчет энтальпий образования азотсодержащих полициклических ароматических углеводородов (НПАУ) в газовой фазе.

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 порядка 20 НПАУ, для которых известны экспериментальные значения энтальпий образования в газовой фазе.

Анализ полученных результатов показал, что наилучшая корреляционная связь между экспериментальными и расчетными значениями энтальпий образования имеет место при использовании метода AM1. Зависимость носит линейный характер и может быть использована для прогнозирования энтальпий образования НПАУ в газовой фазе, экспериментальные значения для которых не определены.