

Суббот К.В.

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ 4-ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОФЕНОНА

Научный руководитель: канд. хим. наук Контява О.В.

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Производные ацетофенона широко применяются в качестве лекарственных препаратов, обладающих снотворным действием. Кроме того, ацетофенон и его производные используются в парфюмерии как душистые вещества, в синтезе красителей, люминофоров, синтетических волокон и других продуктов.

Экспериментальное определение энтальпии образования является трудоёмким процессом. В связи с этим актуально применение теоретических методов. Так, энтальпия образования может быть предсказана с помощью квантово-химических расчётов.

Цель: рассчитать энтальпию образования 4-циклогексилацетофенона в газовой фазе методом реакции атомизации и методом изодесмических реакций, сравнить полученные результаты с экспериментальными данными.

Материалы и методы. Для определения энтальпии образования использовались методы изодесмических реакций и атомизации. Для реализации этих методов произвели построение изодесмических реакций, квантово-химические расчёты энтальпий образования с помощью программного комплекса Gaussian методами B3LYP/6-311+G(d,p) и G4.

Результаты и их обсуждение.

Определение энтальпии образования 4-циклогексилацетофенона производили по реакции атомизации: $14C + 18H + O = C_{14}H_{18}O$.

Также рассчитали энтальпию образования соединения в газовой фазе с использованием следующих изодесмических реакций:

1. Получение 4-циклогексилацетофенона и этана из ацетона, пара-ксилола и метилциклогексана;
2. Получение 4-циклогексилацетофенона и метана из циклогексилбензола и ацетона
3. Получение 4-циклогексилацетофенона, метана, водорода из бензола, циклогексана и ацетона.
4. Получение 4-циклогексилацетофенона и водорода из бензола, циклогексана, ацетальдегида.

Выводы: методами B3LYP/6-311+G(d,p) и G4 проверены модели для предсказания энтальпии образования 4-циклогексилацетофенона с помощью четырех изодесмических реакций и реакции атомизации, результаты которых сопоставимы между собой.