

## О ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ЭМПИРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СТАНДАРТНЫХ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ФУЛЛЕРЕНОВ

Эль Занин А. Р. (Волгоградский государственный университет)

Научный руководитель – доцент, кандидат технических наук, Борознин С. В.  
(Волгоградский государственный университет)

**Введение.** Фуллерены – молекулярные соединения, имеющие форму выпуклых многогранников, в вершинах которых расположены атомы углерода в состоянии  $sp^2$ -гибридизации. Наиболее изученными представителями класса являются фуллерены  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , что связано с возможностью их получения и выделения в достаточном для экспериментальных исследований количестве. Постановка эксперимента с целью изучения свойств других представителей рассматриваемого класса часто затруднительна. По этой причине особенно важная роль при изучении фуллеренов отводится теоретическим подходам. В литературе описано довольно много аддитивных схем для расчета стандартных энтальпий образования органических веществ. Поскольку фуллерены, как мы уже говорили выше, представляют собой углеродные молекулярные соединения, то логичным является предположение о том, что такие схемы к ним также применимы. Целью работы является оценка применимости существующих эмпирических методов расчета стандартных энтальпий образования органических соединений для фуллеренов.

**Основная часть.** Рассмотрение молекул фуллеренов будет проводиться в двух приближениях:

I. атомы углерода в фуллеренах связаны только одинарными и двойными связями;

II. атомы углерода связаны одинарными и двойными связями, а также учитывается наличие делокализованных  $\pi$  – связей.

Оба подхода не отражают реальное строение молекул фуллеренов, однако без принятия такого рода допущений было бы проблематично рассмотреть свойства представителей данного класса соединений методами химической термодинамики, разработанными для хорошо изученных классов органических соединений.

В рамках настоящей работы были выбраны четыре аддитивные схемы [1,2]:

- 1) метод Лайдлера;
- 2) метод Франклина;
- 3) метод Мэтьюза – Соудерса – Харда;
- 4) метод Джобака – Рида.

С их использованием были рассчитаны стандартные энтальпии образования фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  в газовой фазе, полученные значения сравнивались со принятыми за эталонные значениями из базы данных NIST [3]. Определялась относительная погрешность расчета, на основе чего делался вывод о применимости того или иного метода для рассматриваемых целей.

**Выводы.** Проведенный анализ позволил установить, что наиболее удовлетворительные результаты могут быть получены с использованием метода Мэтьюза – Соудерса – Харда в I приближении, относительная погрешность расчета составила 4,44% и 5,95% для фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  соответственно. Хорошая согласованность с экспериментальными данными также была продемонстрирована при использовании метода Франклина во II приближении для фуллерена  $C_{70}$ , относительная погрешность расчета составила 1,80%. В остальных случаях результаты значительно отклоняются от эталонных значений. Таким образом, расчеты по методу Мэтьюза – Соудерса – Харда в I приближении показали наиболее оптимальный результат для обоих рассмотренных фуллеренов, поэтому в определенных случаях можно рекомендовать использовать данный метод для оценки стандартных энтальпий образования

представителей класса фуллеренов в целом. Тем не менее, очевидной является необходимость разработки новых эмпирических расчетных методов определения термодинамических характеристик рассматриваемых соединений с учетом характерных только для них особенностей строения.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001).

**Список используемых источников:**

1. Казанская А. С., Скобло В. А. – Расчеты химических равновесий. Сборник примеров и задач: учебное пособие для вузов/ под ред. Г. М. Панченкова – М.: Высшая школа, 1974. – 288 с., с илл.

2. Joback K. G., Reid R. C. Estimation of pure-component properties from group-contributions //Chemical Engineering Communications. – 1987. – Т. 57. – №. 1-6. – С. 233-243.

3. NIST Chemistry WebBook: NIST Standard Reference Database Number 69 / Eds. P.J. Linstrom, W.G. Mallard. – Gaithersburg MD: National Institute of Standards and Technology, 2023. URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/> (дата обращения: 23.01.2023).