

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

УДК 541.6

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ДВУХАТОМНЫХ СПИРТОВ. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

М.Г. Виноградова, Р.Р. Козлова, Т.А. Савельева
Тверской государственный университет (г. Тверь)

© Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Савельева Т.А., 2021

Аннотация. Исследована энтальпия образования $\Delta_f H^\circ_{298(ж)}$ двухатомных спиртов. Выведены рабочие формулы, дана их теоретико-графовая интерпретация. Проведены численные расчеты, согласующиеся с экспериментом, и получены новые данные. Установлены закономерности, связывающие энтальпию образования со строением двухатомных спиртов. Показано, что энтальпия образования зависит от длины цепи, разветвленности двухатомных спиртов и расположения гидроксогрупп.

Ключевые слова: структура, энтальпия образования, расчетные методы.

DOI: 10.46573/2658-7459-2021-1-71-79

ВВЕДЕНИЕ

Важной задачей теоретической химии является определение свойств химических соединений на основе их молекулярной структуры. Экспериментальных сведений по корреляциям «структура – свойство» немного, в том числе и для двухатомных спиртов. Именно поэтому актуальная задача современной химии заключается в том, чтобы установить связь между строением соединений и их свойствами. Решение данной задачи даже для одного класса соединений значительно расширяет возможности теоретической химии.

Цель работы – выявить закономерности в энтальпии образования двухатомных спиртов, провести численные расчеты.

Объект исследования – двухатомные спирты. Гликоли предотвращают кристаллизацию и высыхание активных веществ, служат в качестве растворителей и пластификаторов, применяются для получения различных эфиров, полиуретанов и др.

В работе применяли феноменологические методы исследования, методы теории графов, методы линейной алгебры, метод наименьших квадратов (МНК) [1, 2] и др.

Феноменологические методы используют в виде аддитивных схем расчета и прогнозирования, с помощью которых и рассчитывается энтальпия образования молекул [1, 3, 4] и другие свойства [5–11].

По теме исследования есть литература обзорного характера, монографии и др. [1–15].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Как указывалось в работах [1, 11], в феноменологическом методе молекула рассматривается в качестве системы взаимодействующих атомов. Энтальпия образования

может быть представлена суммой свойств, приходящихся на атом-атомные взаимодействия отдельных атомов (p_α), пары атомов ($p_{\alpha\beta}$), трех атомов ($p_{\alpha\beta\gamma}$) и т.д. [1, 2, 11].

При теоретико-графовом подходе исследуются математические модели молекулярной структуры – химические графы. В качестве дескрипторов для изучения корреляций «структура – свойство» в теоретико-графовом подходе [1, 2, 10] часто используются топологические индексы (ТИ).

Неизвестные параметры в феноменологическом и теоретико-графовом методах находятся через экспериментальные данные с помощью МНК [1, 2, 11].

Результаты расчетов оценивались с помощью средней абсолютной ошибки расчета ($|\bar{\varepsilon}|$), максимального отклонения ($\varepsilon_{\max}$) и др.

В работе построены аддитивные схемы расчета для двухатомных спиртов в разных приближениях.

Простые схемы не учитывают взаимного влияния между несвязанными атомами:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = h_{CC}p_{C-C} + h_{CO}p_{C-O} + h_{CH}p_{C-H}. \quad (1)$$

Эти схемы не отображают эффект структурной изомерии.

В первом приближении учитывается взаимное влияние атомов, удаленных не далее чем через один скелетный атом по цепи молекулы:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = h_{CC}p_{C-C} + h_{CO}p_{C-O} + h_{CH}p_{C-H} + x_{CC_1}\Gamma_{CC} + x_{CO_1}\Gamma_{CO} + \\ + x_{OO_1}\Gamma_{OO} + x_{CCC_1}\Delta_{CCC} + x_{CCO_1}\Delta_{CCO} + x_{COO_1}\Delta_{COO}. \quad (2)$$

Во втором приближении учитывается еще и взаимное влияние атомов, удаленных не далее чем через два скелетных атома по цепи молекулы:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = h_{CC}p_{C-C} + h_{CO}p_{C-O} + h_{CH}p_{C-H} + x_{CC_1}\Gamma_{CC} + x_{CO_1}\Gamma_{CO} + \\ + x_{OO_1}\Gamma_{OO} + x_{CCC_1}\Delta_{CCC} + x_{CCO_1}\Delta_{CCO} + x_{COO_1}\Delta_{COO} + x_{CC_2}\tau_{CC} + x_{CO_2}\tau_{CO} + x_{OO_2}\tau_{OO}. \quad (3)$$

В третьем приближении добавляется также и взаимное влияние атомов, удаленных не далее чем через три скелетных атома по цепи молекулы:

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = h_{CC}p_{C-C} + h_{CO}p_{C-O} + h_{CH}p_{C-H} + x_{CC_1}\Gamma_{CC} + x_{CO_1}\Gamma_{CO} + \\ + x_{OO_1}\Gamma_{OO} + x_{CCC_1}\Delta_{CCC} + x_{CCO_1}\Delta_{CCO} + x_{COO_1}\Delta_{COO} + x_{CC_2}\tau_{CC} + x_{CO_2}\tau_{CO} + \\ + x_{OO_2}\tau_{OO} + x_{CC_3}\omega_{CC} + x_{CO_3}\omega_{CO} + x_{OO_3}\omega_{OO} \quad (4)$$

и т.д.

При определенных допущениях схема (4) переходит в (3), схема (3) – в схему (2), а последняя – в схему (1).

Формулы (1)–(4) удобны для массового расчета и прогнозирования различных свойств двухатомных спиртов, в том числе и энтальпии образования.

Для двухатомных спиртов схемы (1)–(4) могут быть записаны через ТИ. Так, в третьем приближении получаем

$$P_{C_nH_{2n+2}O_2} = a + bn + p_2\Gamma_{CC} + p'_2\Gamma_{CO} + p''_2\Gamma_{OO} + R\Delta_{CC} + \quad (5)$$

$$+ R'\Delta_{CCO} + R''\Delta_{COO} + p_3\tau_{CC} + p'_3\tau_{CO} + p''_3\tau_{OO} + p_4\omega_{CC} + p'_4\omega_{CO} + p''_4\omega_{OO},$$

где $p_2, p_3, p_4, \dots$ – такие индексы, как число путей длины два, три, четыре; R – число троек смежных ребер; n – число атомов углерода; b, Γ_{CC} – параметры.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

После анализа экспериментальных данных по энтальпии образования $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ двухатомных спиртов можно установить следующие закономерности [1, 2, 11]:

1. Энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы. Данная зависимость носит линейный характер для гомологов аналогичного строения. Это говорит о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы.

2. При увеличении длины цепи молекулы $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ уменьшается (табл. 1).

3. Разности энергий между структурными изомерами двухатомных спиртов достигают 40 кДж/моль, причем наименьшее значение $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ имеют неразветвленные двухатомные спирты с гидроксильными группами, расположенными у соседних атомов углерода (табл. 1).

4. Энтальпия образования уменьшается при разветвлении молекул (табл. 1).

Таблица 1

Энтальпии образования двухатомных спиртов
в жидкой фазе (кДж/моль)

№	Молекула	$\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ Опыт [15]
1	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-453,3
2	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	-485,7
3	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-464,9
4	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-501,0
5	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-503,3
6	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	-541,5
7	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	-539,7
8	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-531,5

В табл. 2 и 3 приведены найденные МНК значения энтальпийных параметров и результаты расчета энтальпий образования в жидкой фазе ряда двухатомных спиртов по схемам (1)–(4) и (5) соответственно.

Из-за нехватки экспериментальных данных получились системы с линейно зависимыми столбцами, поэтому в схемах (1)–(4) параметры p_{c-n} , Γ_{oo} , Δ_{coo} и ω_{cc} пропадают, параметры p_{c-c} , p_{c-o} заменены на параметр a , а параметры Γ_{cc} и Γ_{co} , Δ_{ccc} и Δ_{cco} , τ_{cc} и τ_{co} – на параметры b , c и d .

Здесь

$$\begin{aligned} a &= h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o}; \\ b &= x_{cc_1}\Gamma_{cc} + x_{co_1}\Gamma_{co}; \\ c &= x_{ccc_1}\Delta_{ccc} + x_{cco_1}\Delta_{cco}; \\ d &= x_{cc_2}\tau_{cc} + x_{co_2}\tau_{co}. \end{aligned}$$

В схеме (5) пропадают параметры Γ_{co} , Γ_{oo} , Δ_{coo} и ω_{cc} (по той же причине), а параметры Δ_{ccc} и Δ_{cco} , τ_{cc} и τ_{co} , ω_{co} и ω_{oo} заменены на параметры c , d и f , где

$$c = R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{cco};$$

$$d = p_3 \tau_{cc} + p_3' \tau_{co};$$

$$f = p_4' \omega_{co} + p_4'' \omega_{oo}.$$

Таблица 2

Параметры схем и результаты расчета энтальпий образования
в жидкой фазе двухосновных спиртов (кДж/моль)
в разных приближениях по схемам (1)–(4)

Параметр	Значения параметров оценки при их различном числе $\Delta_f H^\circ(\text{ж}, 298 \text{ K})$				
	1	2	3	5	7
a	–106,095	–106,427	–392,788	–357,178	–376,394
b	–	0,328	365,507	327,289	368,876
c	–	–	–376,439	–331,137	–377,347
d	–	–	–	–6,918	–19,129
τ_{oo}	–	–	–	–33,626	–60,706
ω_{co}	–	–	–	–	–20,112
ω_{oo}	–	–	–	–	–8,565
$\left \frac{\bar{\varepsilon}}{\varepsilon_{\max}} \right $	52,3 135,0	52,5 –134,7	6,9 17,7	2,5 5,8	0,6 –1,6

Таблица 3

Параметры схем и результаты расчета энтальпий образования
в жидкой фазе двухосновных спиртов (кДж/моль)
в разных приближениях по схеме (5)

Параметр	Значения параметров оценки при их различном числе $\Delta_f H^\circ(\text{ж}, 298 \text{ K})$				
	2	3	4	6	7
a	–390,230	–363,533	–340,094	–358,648	–388,537
b	–31,002	–27,058	–27,035	–29,824	–4,800
Γ_{cc}	–	–14,258	–25,630	0,824	23,762
c	–	–	9,172	–4,437	–23,900
d	–	–	–	–7,070	–25,837
τ_{oo}	–	–	–	–33,989	–103,500
f	–	–	–	–	–31,975
$\left \frac{\bar{\varepsilon}}{\varepsilon_{\max}} \right $	14,0 27,3	6,7 –13,5	6,5 –15,0	2,8 5,8	0,6 1,6

В зависимости от полноты учета влияния несвязанных атомов согласованность рассчитанных и экспериментальных значений $\Delta_f H^\circ(\text{ж}, 298 \text{ K})$ увеличивается.

Те рассчитанные величины, которые согласуются с экспериментальными, позволяют предсказать недостающие значения энтальпии образования членов исследуемого ряда.

В табл. 4 и 5 представлены параметры схем расчета (4) и (5), а в табл. 6 – результаты расчета энтальпии образования в жидкой фазе двухатомных спиртов C₂-C₅ по схеме (5).

Таблица 4

Параметры расчета свойств двухатомных спиртов в жидкой фазе (схема (4))

Молекула	Число параметров						
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	τ_{OO}	ω_{CO}	ω_{OO}
HOCH ₂ CH ₂ OH	3	2	0	0	1	0	0
CH ₃ CH(OH)CH ₂ OH	4	4	1	1	1	0	0
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	4	3	0	3	0	0	1
CH ₃ CH(OH)CH ₂ CH ₂ OH	5	5	1	3	0	1	1
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	5	4	0	3	0	2	0
CH ₃ CH(OH)CH(OH)CH ₃	5	6	2	3	1	0	0
(CH ₃) ₂ C(OH)CH ₂ OH	5	8	4	2	1	0	0
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	6	5	0	4	0	2	0

Таблица 5

Параметры расчета свойств двухатомных спиртов в жидкой фазе (схема (5))

Молекула	Число параметров						
	<i>a</i>	<i>b</i>	Γ_{CC}	<i>c</i>	<i>d</i>	τ_{OO}	<i>f</i>
HOCH ₂ CH ₂ OH	1	2	0	0	0	1	0
CH ₃ CH(OH)CH ₂ OH	1	3	1	1	1	1	0
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	1	3	1	0	3	0	1
CH ₃ CH(OH)CH ₂ CH ₂ OH	1	4	2	1	3	0	2
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	1	4	2	0	3	0	2
CH ₃ CH(OH)CH(OH)CH ₃	1	4	2	2	3	1	0
(CH ₃) ₂ C(OH)CH ₂ OH	1	4	3	4	2	1	0
HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	1	5	3	0	4	0	2

Таблица 6

Результаты расчета энтальпий образования
двухатомных спиртов в жидкой фазе по схеме (5) (кДж/моль)

№	Молекула	$\Delta_f H^{\circ}_{298(ж)}$	
		Опыт [15]	Расчет
1	CH ₃ CH(OH) ₂	–	–398,1
2	HOCH ₂ CH ₂ OH	–453,3	–452,1
3	CH ₃ CH ₂ CH(OH) ₂	–	–430,8
4	CH ₃ CH(OH)CH ₂ OH	–485,7	–487,3
5	HOCH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	–464,9	–464,9
6	(CH ₃) ₂ C(OH) ₂	–	–427,0
7	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH(OH) ₂	–	–596,7
8	CH ₃ CH ₂ CH(OH)CH ₂ OH	–	–597,1
9	CH ₃ CH(OH)CH ₂ CH ₂ OH	–501,0	–501,0

Окончание табл. 6

№	Молекула	$\Delta_f H^\circ_{298(\text{ж})}$	
		Опыт [15]	Расчет
10	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-503,3	-504,1
11	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{OH})_2\text{CH}_3$	—	-485,5
12	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	-541,5	-541,5
13	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{OH})_2$	—	-487,6
14	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	-539,7	-539,3
15	$(\text{CH}_2\text{OH})\text{CHCH}_2\text{OH}$	—	-495,7
16	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})_2$	—	-508,5
17	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	—	-604,0
18	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	—	-558,3
19	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	—	-532,4
20	$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	-531,5	-530,7
21	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{OH})_2\text{CH}_3$	—	-556,3
22	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	—	-653,7
23	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	—	-588,3
24	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{OH})_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	—	-544,1
25	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{OH})_2$	—	-572,6
26	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	—	-661,9
27	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	—	-612,4
28	$(\text{HO})_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	—	-560,4
29	$\text{HOCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	—	-534,5
30	$(\text{HOCH}_2)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_3$	—	-592,3
31	$\text{HOCH}_2\text{C}(\text{OH})(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	—	-526,4
32	$(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{OH})_2\text{CH}_3$	—	-544,2
33	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	—	-669,7
34	$\text{HOCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	—	-558,4
35	$(\text{CH}_3)_3\text{CCCH}(\text{OH})_2$	—	-520,6
36	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_2\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$	—	-552,6

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выявлены закономерности, связывающие энтальпию образования со строением двухатомных спиртов. Установлено, что энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы и носит линейный характер для гомологов аналогичного строения, что говорит о постоянном энергетическом вкладе CH_2 -группы. При увеличении длины цепи молекулы и ее разветвленности энтальпия образования $\Delta_f H^\circ_{298(\text{ж})}$ уменьшается. Разности энергий между структурными изомерами двухатомных спиртов достигают 40 кДж/моль, причем наименьшее значение $\Delta_f H^\circ_{298(\text{ж})}$ имеют неразветвленные двухатомные спирты с гидроксильными группами, расположенными у соседних атомов углерода.

Были выведены также рабочие формулы для расчета энтальпии образования соединений. По данным схемам проведено систематическое расчетно-теоретическое исследование. Расчетным путем получена новая числовая информация об энтальпии образования двухатомных спиртов. Эти данные могут быть использованы химиками-

технологами и инженерами-химиками при проведении термодинамических расчетов технологических процессов в нефтехимии и химии топлива, а также при подготовке справочных изданий по термодинамическим свойствам веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь: ТвГУ, 2002. 232 с.
2. Виноградова М.Г. Расчетные методы исследования взаимосвязи «структура – свойство» в атом-атомном представлении: дис. ... докт. хим. наук. Тверь, 2004. 440 с.
3. Степанов Н.Ф., Ерлыкина М.Е., Филиппов Г.Г. Методы линейной алгебры в физической химии. М.: МГУ, 1976. 360 с.
4. Яровой С.С. Методы расчета физико-химических свойств углеводородов. М.: Химия, 1978. 256 с.
5. Виноградова М.Г., Жерихова А.М. Энергия Гиббса алкинов // *Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований*. 2016. № 2 (3). С. 292–293.
6. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А., Сайфуллин И.Ш. Термохимия органических свободных радикалов. М.: Наука, 2001. 304 с.
7. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А. Взаимосвязь феноменологических методов расчета энтальпий образования свободных радикалов (энергий диссоциации химических связей) // *Журнал физической химии*. 1993. Т. 67. № 5. С. 925–932.
8. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Энергия химических связей: основные закономерности и методы расчета: обзор // *Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»*. 2006. № 8 (25). Вып. 3. С. 5–39.
9. Vinogradova M.G., Fedina Yu.A., Papulov Yu.G. Graph Theory in Structure–Property Correlations. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2016. Vol. 90. No. 2, pp. 411–416.
10. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Теоретико-графовые методы в химии: учебное пособие. Тверь: Тверской государственный университет, 2013. 88 с.
11. Виноградова М.Г. Энтальпия образования в кетонах // *Вестник Тверского государственного технического университета. Серия «Строительство. Электротехника и химические технологии»*. 2019. № 2 (2). С. 75–82.
12. Pedley I.B., Naylor R.D., Kirly S.P. Thermochemical Data of Organic Compounds. London; New York: Chapman and Hall, 1986. 792 p.
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / под ред. В.П. Глушко. М.: Наука, 1978. Т. 1. 495 с.; 1979. Т. 2. 431 с.
14. Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г. Химическая термодинамика органических соединений. М.: Мир, 1971. 944 с.
15. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 10.12.2021).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВИНОГРАДОВА Марина Геннадьевна – доктор химических наук, профессор, профессор кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. E-mail: Vinogradova.MG@tversu.ru

КОЗЛОВА Рада Романовна – студентка кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. E-mail: cozlovarada@yandex.ru

САВЕЛЬЕВА Татьяна Алексеевна – студентка кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. E-mail: savelievatanya13@gmail.com

БИБЛИОГРАФИЧЕСКАЯ ССЫЛКА

Виноградова М.Г., Козлова Р.Р., Савельева Т.А. Энтальпия образования двухатомных спиртов. Численные расчеты и основные закономерности // Вестник Тверского государственного технического университета. Серия «Строительство. Электротехника и химические технологии». 2021. № 1 (9). С. 71–79.

THE ENTHALPY OF FORMATION OF DIATOMIC ALCOHOLS. NUMERICAL CALCULATIONS AND BASIC REGULARITIES

M.G. Vinogradova, R.R. Kozlova, T.A. Savelyeva
Tver State Technical University (Tver)

Abstract. The enthalpy of formation of $\Delta_f H^\circ_{298(lg)}$ diatomic alcohols is discussed. Working formulas are derived, and their graph-theoretic interpretation is given. Numerical calculations consistent with the experiment are carried out. New data have been obtained. A number of regularities linking the enthalpy of formation with the structure of diatomic alcohols have been established. It is found that the enthalpy of formation depends on the chain length, branching diatomic alcohols and location of hydroxo groups.

Keywords: structure, education enthalpy, calculation methods.

REFERENCES

1. Papulov Y.G., Vinogradova M.G. Calculation Modi Atom, Atom in Repraesentationem [Calculation Methods in Atom-atom Representation]. Tver: Tver State University, 2002. 232 p.
2. Vinogradova M.G. Computational Methods for the Study of the Relationship «Structure-property» in the Atom-atom Representation: Dis. ... Doctor (Chemical Sciences). Tver, 2004. 440 p.
3. Stepanov N.F., Erlykina M.E., Filippov G.O. Linear Algebra Physica Elit in Elit [Methods of Linear Algebra in Physical Chemistry]. Moscow: MGU, 1976. 360 p.
4. Yarovoy S.S. Quia Modi Proprietatibus Computandi Triangulorum & Physico Chymicam Hydrocarbonum [Methods for Calculating the Physicochemical Properties of Hydrocarbons]. Moscow: Quaestiones, 1978. 256 p.
5. Vinogradova M.G., Zherikhova A.M. Gibbs Energy of Alkynes. *Acta De International Research and Latin*. 2016. No. 2 (3), pp. 292–293. (In Russian).
6. Orlov Y.D., Lebedev Y.A., Saifullin I.Sh. Thermochemistry Organicum Liberum Radicalis [Thermochemistry of Organic Free Radicals]. Moscow: Nauka, 2001. 304 p.
7. Orlov Y.D., Lebedev Y.A. The Relationship of Phenomenological Methods for Calculating the Enthalpies of Formation of Free Radicals (Dissociation Energies of Chemical Bonds). *Zh. Nat. Chemia*. Vol. 67. 1993. No. 5, pp. 925–932 (In Russian).
8. Papulov Y.G., Vinogradova M.G. Energy of Chemical Bonds: Basic Laws and Methods of Calculation: overview. *Vestnik Tver de re Publica University. «Chemia» series*. 2006. No. 8 (25). Vol. 3, pp. 5–39. (In Russian).
9. Vinogradova M.G., Fedina Yu. A., Papulov Yu.G. Graph Theory in Structure–Property Correlations. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2016. Vol. 90. No. 2, pp. 411–416.

10. Vinogradova M.G., Papulov Y.G. *Teoretiko-grafovye Metody v Himii: Uchebnoe Posobie*. [Theoretical and Graph Methods in Chemistry: Tutorial.] Tver: Tver State University, 2013. 88 p.
11. Vinogradova M.G. *Ketones Confractus Necessitudines in Industria. Secundum Numerum Basic Rationes et Leges. Technical Vestnik de Tver publica University. Series «Construction. Et electrica engineering eget technology»* 2019. No. 2 (2), pp. 70–78. (In Russian).
12. Pedley I.B., Naylor R.D., Kirly S.P. *Thermochemical Data of Organic Compounds*. London; New York: Chapman and Hall, 1986. 792 p.
13. *Termodinamicheskie Individuae Sunt Substantiae Proprietatibus* [Thermodynamic Properties of Individual Substances] / Ed. Glushko. Moscow: Science, 1978. Vol. 1, p. 495; CDXXXI. 1979. Vol. 2, p. 431.
14. Stall D., Vastra L., Zinke H. *Donec Termodinámica de Organic Composita* [Chemical Thermodynamics of Organic Compounds]. Moscow: Undique, 1971, p. 944.
15. *De Historiae Lange* [Lange's Handbook of Chemistry] / Editor: J.A. Dean. (15 Edition) Nabu. 1999. URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (date of access: 10.12.2021).

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

VINOGRADOVA Marina Gennadievna – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Professor of Physical Chemistry, Tver State University, 33, Zhelyabova st., Tver, 170100, Russia. E-mail: Vinogradova.MG@tversu.ru

KOZLOVA Rada Romanovna – Student of the Department of Physical Chemistry, Tver State University, 33, Zhelyabova St., Tver, 170100, Russia. E-mail: kozlovarada@yandex.ru

SAVEL'EVA Tat'yana Alekseevna – Student of the Department of Physical Chemistry, Tver State University, 33, Zhelyabova st., Tver, 170100, Russia. E-mail: savelievatanya13@gmail.com

CITATION FOR AN ARTICLE

Vinogradova M.G., Kozlova R.R., Savelyeva T.A. The Enthalpy of Formation of Diatomic Alcohols. Numerical Calculations and Basic Regularities // *Vestnik of Tver State Technical University. Series «Building. Electrical Engineering and Chemical Technology»*. 2021. No. 1 (9), pp. 71–79.

УДК 627.157:002.637(282.247.41)

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Г.Н. Иванов, И.В. Кривенко, М.А. Смирнова, С.Р. Испирян
Тверской государственный технический университет (г. Тверь)

© Иванов Г.Н., Кривенко И.В.,
Смирнова М.А., Испирян С.Р., 2021

Аннотация. Изучена актуальная проблема внутрихозяйственного землеустройства – оценка состояния водных объектов и общего уровня техногенной нагрузки на них. Отмечено, что одним из наиболее объективных и надежных показателей, необходимых для