

УДК 661.715.5

РАЗРАБОТКА ПОДХОДОВ РАСЧЕТА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ.

Жакова Л. П. , Подцыкина П.А. , ученики 10 класс

Научный руководитель: Охотина Надежда Николаевна, учитель химии

Научный консультант: Пучков Сергей Вениаминович, к.х.н., доцент,
зав. кафедрой «Технология органических веществ и нефтехимии» Института
химических и нефтехимических технологий Кузбасского государственного
технического университета им. Т.Ф. Горбачева

МБОУ «Лицей №23»

г. Кемерово.

Цель работы:

1. Поиск методов, позволяющих проводить расчеты физико-химические свойств органических соединений.
2. Установление закономерностей связывающих строение и свойства вещества и разработка математических методов позволяющих свести к минимуму расхождения между расчетными и экспериментальными значениями физико-химических величин.

Задачи:

1. Поиск литературных данных об экспериментально определенных температурах кипения n-алканов C1-C20
2. Анализ зависимости температуры кипения от строения (числа атомов углерода) n-алкана
3. Расчет температур кипения n-алканов C1-C20 с применением программ ChemBioDraw Ultra 12.0 и ChemBio 3D Ultra 12.0 пакета программ ChemBioOffice 2010 Trial.
4. Сопоставление результатов расчета температур кипения с экспериментальными значениями температур кипения; разработка метода позволяющего свести к минимуму расхождение между расчетными и экспериментальными значениями температур кипения.
5. Изучение влияния температуры кипения n-алкана на время удерживания n-алканов при хроматографировании смеси n-алканов;
6. Установление функциональной связи температуры кипения и времени удерживания n-алканов при хроматографировании смеси n-алканов, позволяющей предсказывать время удерживания индивидуальных n-алканов.

Актуальность:

Разработанный подход при расчете температуры кипения н-алканов позволяет получить достаточно точное значение этой физико-химической характеристики без проведения экспериментального измерения. Полученная функциональная зависимость времени удерживания н-алканов от их температуры кипения при хроматографировании смеси н-алканов, позволяет предсказывать время удерживания индивидуальных н-алканов, что может быть использовано при хроматографическом анализе состава моторных топлив являющихся, как известно сложной смесью углеводородов. Разработанные подходы и методы могут быть использованы для расчета и предсказания других физико-химических характеристик н-алканов и могут быть применены к другим классам органических соединений.

Экспериментальная часть:

Работа разбита на два этапа. Первый этап предполагает получение данных о температурах кипения н-алканов опытным путем простой перегонки и с использованием программ ChemBioOffice 2010 Trial. И последующую разработку метода корректировки расчетных температур кипения н-алканов с применением математических методов. Второй этап – получения функциональной зависимости времени удерживания н-алканов от их температуры кипения при хроматографировании смеси н-алканов.

Выводы:

1. Разработан метод позволяющий свести к минимуму расхождение между расчетными и экспериментальными значениями температур кипения.
2. Установлена функциональная зависимость температуры кипения и времени удерживания н-алканов при хроматографировании смеси н-алканов, позволяющая предсказывать время удерживания индивидуальных н-алканов.

Список литературы:

1. Практикум по органической химии. Синтез и идентификация органических соединений : учеб. пособие для студентов хим.-технолог. специальностей вузов / под ред. О. Ф. Гинзбурга, А. А. Петрова. – М. : Высшая школа, 1989. – 317 с.
2. Свойства органических соединений: Справочник / Под ред. А.А. Потехина. – Л.: Химия, 1984. – 520 с.