

УДК 541.6

DOI 10.26456/vtchem2020.1.8

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ АЛЬДЕГИДОВ. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

М.Г. Виноградова, Э.А. Серёгин

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» г. Тверь;

Выведены рабочие формулы. Приведены численные расчеты энтальпии образования альдегидов. Сделаны предсказания. Результаты расчетов согласуются с экспериментом. Выявлены определенные закономерности.

Ключевые слова: структура, энтальпия образования, численные расчёты.

Экспериментальных сведений по энтальпии образования альдегидов немного. Развитие же расчетных методов и получение с их помощью новой информации в настоящее время является актуальным.

Цель работы – установление через аналитические выражения количественных корреляций «структура-свойство» в альдегидах, проведение расчетов.

Объект исследования: алифатические альдегиды. Они широко используются в производстве пластмасс, в органическом синтезе.

В работе применялись – феноменологические методы, непосредственно основывающиеся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле. В ряде задач используются методы линейной алгебры, в частности, матричное исчисление. Сюда относится выбор линейно независимых параметров расчетных схем (по рангу матриц), их определение через исходные экспериментальные данные и т.д. В работе использовались также методы статистической обработки численных данных и методы регрессионного анализа.

Данные методы реализуются в виде аддитивных схем расчета и прогнозирования [1-3].

Рассмотрим аддитивные схемы расчета для альдегидов.

Простые схемы не учитывают взаимное влияние между несвязанными атомами.

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

Такие схемы не отображают эффекта структурной изомерии.

В первом приближении рассмотрим взаимное влияние атомов, удалённых не далее чем через один скелетный атом по цепи молекулы.

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} \quad (2)$$

Во втором приближении добавляется взаимное влияние атомов, удалённых не далее чем через два скелетных атома по цепи молекулы.

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + \\ + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} \quad (3)$$

В третьем приближении учитывается также и взаимное влияние атомов, удалённых не далее чем через три скелетных атома по цепи молекулы.

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + \\ + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} + x_{cc3}\omega_{cc} + x_{co3}\omega_{co} \quad (4)$$

В четвёртом приближении добавляется взаимное влияние атомов, удалённых не далее чем через четыре скелетных атома по цепи молекулы.

$$P_{C_nH_{2n}O} = h_{cc}p_{c-c} + h_{co}p_{c-o} + h_{cn}p_{c-n} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + \\ + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co} + x_{cc3}\omega_{cc} + x_{co3}\omega_{co} + x_{cc4}\nu_{cc} + x_{co4}\nu_{co} \quad (5)$$

и т.д.

При определённых допущениях схема (5) переходит в схему (4), схема (4) — в схему (3), схема (3) - в схему (2), а последняя – в схему (1).

Формулы (1)-(5) удобны для массового расчёта и прогнозирования различных свойств альдегидов.

Экспериментальных данных по $\Delta_f H^0_{298(r)}$ альдегидов немного (табл.1). Из них можно установить следующие зависимости:

- 1) Энтальпия образования зависит от длины цепи молекулы.
- 2) При увеличении длины цепи молекулы $\Delta_f H^0_{298(ж)}$ уменьшается (табл. 1).
- 3) Разности энергий между структурными изомерами альдегидов достигают 11 кДж/моль (табл. 1).

В табл. 2. Приведены, найденные МНК значения параметров и результаты расчета энтальпий образования в газовой фазе ряда альдегидов по схемам (1) – (5).

В результате нехватки экспериментальных данных получилась плохообусловленная система с линейнозависимыми столбцами. Поэтому в схемах (1)-(5) было убрано первое уравнение, параметры p_{c-c} ,

p_{c-o} , p_{c-n} были заменены на параметр a . Параметры Γ_{co} ; τ_{cc} ; ω_{cc} ; ν_{cc} пропадают.

Здесь

$$a = p_{c-c} + p_{c-o} + p_{c-n}$$

Уравнение (5) приобретает следующий вид:

$$\Delta_f H^0_{(z, 298K)} = a + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{co2} \tau_{co} + x_{co3} \omega_{co} + x_{co4} \nu_{co}$$

Приведены показатели расчета - средняя абсолютная ошибка ($|\bar{\varepsilon}|$) и максимальное отклонение (ε_{\max}).

Таблица 1.

Энтальпии образования альдегидов в газовой и в жидкой фазах
(в кДж/моль)

№	Молекула	$\Delta_f H^0_{298}$ (г)	$\Delta_f H^0_{28}$ (ж)
		Опыт [4]	Опыт [4]
1.	CH ₃ CHO	-166,1	-192,2
2.	CH ₃ CH ₂ CHO	-185,6	-215,3
3.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CHO	-204,9	-239,2
4.	(CH ₃) ₂ CHCHO	-215,8	-247,4
5.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-228,5	---
6.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-248,4	---
7.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-264,0	-311,5
8.	CH ₃ (CH ₂) ₆ CHO	-289,6	---
9.	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₂ CH ₃)CHO	---	-342,5
10.	CH ₃ (CH ₂) ₉ CHO	-330,9	---

Таблица 2.

Параметры схем и результаты расчета энтальпий образования в газовой фазе альдегидов (в кДж/моль) в разных приближениях

Параметр	Значения параметров оценки при их различном числе					
	$\Delta_f H^0$ (г, 298 К)					
	1	2	3	4	5	6
a	-12,938	-27,459	-27,543	-27,683	-27,683	-27,683
Γ_{cc}	---	60,440	61,911	62,243	62,236	62,534
Δ_{ccc}	---	---	-71,019	-73,047	-72,936	-73,234
τ_{co}	---	---	---	1,359	1,314	1,016
ω_{co}	---	---	---	---	0,090	1,216
ν_{co}	---	---	---	---	---	-2,781
$ \bar{\varepsilon} $	52,8	11,6	0,5	0,4	0,4	0,1
ε_{\max}	124,4	67,6	-1,8	-1,5	±1,4	±0,3

В табл. 3 представлены найденные МНК значения параметров в жидкой фазе ряда альдегидов по схемам (1) – (4).

В результате нехватки экспериментальных данных получилась система с линейнозависимыми столбцами. Поэтому в схемах (1)-(4) как и для газовой фазы параметры p_{c-c} , p_{c-o} , p_{c-h} были заменены на параметр a , параметры Γ_{co} ; τ_{cc} ; ω_{cc} пропадают.

Здесь

$$a = p_{c-c} + p_{c-o} + p_{c-h}$$

Уравнение (4) приобретает следующий вид:

$$\Delta_f H_{(ж, 298K)}^0 = a + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{co2} \tau_{co} + x_{co3} \omega_{co}$$

Таблица 3.

Параметры схем и результаты расчета энтальпий образования в жидкой фазе альдегидов (в кДж/моль) в разных приближениях

Параметр	Значения параметров оценки при их различном числе				
	$\Delta_f H^0$ (ж, 298 К)				
	1	2	3	4	5
a	-16,661	-29,512	-31,970	-32,033	-32,033
Γ_{cc}	---	53,435	72,048	72,176	71,178
Δ_{ccc}	---	---	-79,720	-80,558	-80,428
τ_{co}	---	---	---	0,664	0,805
ω_{co}	---	---	---	---	0,589
ε	56,8	21,6	0,35	0,28	0,1
ε_{max}	92,2	53,6	$\pm 0,4$	0,7	-0,2

Представленные таблицы дают сравнительную характеристику схем, последовательно учитывающих валентные и невалентные взаимодействия.

Из них хорошо заметно, что по мере учета валентных и невалентных взаимодействий согласие расчёта с экспериментом улучшается.

Как видно из таблиц, рассчитанные величины хорошо согласуются с экспериментальными данными. Это позволяет предсказать недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

В табл. 4 и в табл. 5 показаны результаты расчёта энтальпии образования альдегидов соответственно в газовой и в жидкой фазе от C1-C8 соответственно по формуле (5) и (4).

Таблица 4.

Результаты расчета по уравнению (5) энтальпий образования альдегидов в газовой фазе (кДж/моль).

№	Молекула	$\Delta_f H_{298(T)}^{\circ}$ (кДж/моль)	
		Опыт [4]	Расчёт
1	2	3	4
1	HCHO	-108,6	-109,2
2	CH ₃ CHO	-166,1	-166,1
3	CH ₃ CH ₂ CHO	-185,6	-185,6
4	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CHO	-204,9	-204,9
5	(CH ₃) ₂ CHCHO	-215,8	-215,8
6	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-228,5	-228,2
7	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CHO	---	-234,9
8	CH ₃ CH(CH ₃)CHO	---	-215,8
9	(CH ₃) ₃ CCHO	---	-236,8
10	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-248,4	-248,7
11	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ CHO	---	-262,2
12	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-258,2
13	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-258,4
14	(CH ₃) ₃ CCH ₂ CHO	---	-266,3
15	CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CHO	---	-267,5
16	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₂ CH ₃)CHO	---	-254,4
17	(CH ₃) ₂ CHCH(CH ₃)CHO	---	-265,1
18	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-264,0	-269,2
19	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	-279,9
20	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CHO	---	-282,7
21	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-278,7
22	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-278,9
23	(CH ₃) ₂ CHCH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-292,2
24	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-292,4
25	CH ₃ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CHO	---	-292,7
26	CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CHO	---	-293,1
27	(CH ₃) ₃ CCH ₂ CH ₂ CHO	---	-294,2
28	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CHO	---	-288,4

Продолжение табл. 4

1	2	3	4
29	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-281,5
30	$(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-295,6
31	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-297,8
32	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	-289,6	-289,7
33	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-300,4
34	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-300,4
35	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-303,2
36	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-299,2
37	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-299,4
38	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-313,9
39	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-309,9
40	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-310,1
41	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-321,3
42	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-321,7
43	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-322,0
44	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-322,2
45	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-312,9
46	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-312,7
47	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-303,2
48	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-302,0
49	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-298,2
50	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-323,5
51	$(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-323,9
52	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-322,4
53	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-315,5
54	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-308,7
55	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-308,9
56	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-324,6
57	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-327,2
58	$(\text{CH}_3)_3\text{CC}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-328,1

Таблица 5.

Результаты расчета по уравнению (4) энтальпий образования альдегидов в жидкой фазе (кДж/моль)

№	Молекула	$\Delta_f H_{298(ж)}^\circ$ (кДж/моль)	
		Опыт [4]	Расчёт
1	2	3	4
1	HCHO	---	-96,1
2	CH ₃ CHO	-192,2	-192,2
3	CH ₃ CH ₂ CHO	-215,3	-215,5
4	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CHO	-239,2	-239,1
5	(CH ₃) ₂ CHCHO	-247,4	-247,2
6	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	263,2
7	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CHO	---	-271,1
8	CH ₃ CH(CH ₃)CHO	---	-247,3
9	(CH ₃) ₃ CCHO	---	-256,5
10	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	-287,3
11	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ CHO	---	-295,8
12	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-295,2
13	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-294,9
14	(CH ₃) ₃ CCH ₂ CHO	---	-303,5
15	CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CHO	---	-303,9
16	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₂ CH ₃)CHO	---	-294,4
17	(CH ₃) ₂ CHCH(CH ₃)CHO	---	-302,8
18	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	-311,5	-311,4
19	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	-319,9
20	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ CHO	---	-319,9
21	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-319,3
22	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-319,1
23	(CH ₃) ₂ CHCH(CH ₃)CH ₂ CHO	---	-327,7
24	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH(CH ₃)CHO	---	-327,1
25	CH ₃ CH ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CHO	---	-328,5
26	CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ CHO	---	-328,8
27	(CH ₃) ₃ CCH ₂ CH ₂ CHO	---	-329,4
28	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH(CH ₃)CHO	---	-326,9
29	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₂ CH ₃)CH ₂ CHO	---	-319,3
30	(CH ₃) ₂ CHC(CH ₃) ₂ CHO	---	-329,1
31	(CH ₃) ₃ CCH(CH ₃)CHO	---	-329,5
32	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	-335,5
33	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CHO	---	-344,0

Продолжение табл.5

1	2	3	4
34	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-344,0
35	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-344,0
36	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-343,4
37	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-343,2
38	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-352,5
39	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-351,9
40	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-351,6
41	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-342,2
42	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-342,5
43	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-343,1
44	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-343,7
45	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-351,6
46	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-351,9
47	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-344,1
48	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-343,4
49	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CHO}$	-342,5	-342,6
50	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-345,4
51	$(\text{CH}_3)_2\text{CHC}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-345,7
52	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-358,5
53	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-351,9
54	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-351,3
55	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-351,1
56	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CHO}$	---	-349,2
57	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$	---	-354,9
58	$(\text{CH}_3)_3\text{CC}(\text{CH}_3)_2\text{CHO}$	---	-357,3

Список литературы

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчётные методы в атом-атомном представлении – Тверь: ТвГУ, 2002. 232 с.
2. Виноградова, М.Г. Расчётные методы исследования взаимосвязи “структура-свойство” в атом-атомном представлении: Дис. докт. хим. наук Тверь: ТвГУ, 2004. 440 с.

3. Виноградова М.Г. Энтальпия образования нитрилов. Численные расчеты и основные закономерности. // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия». 2019. № 2 [36]. с. 107–112.
4. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс].
<http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 10.12.18).

Об авторах:

ВИНОГРАДОВА Марина Геннадьевна – доктор химических наук, профессор кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», e-mail: Vinogradova.MG@tversu.ru

СЕРЕГИН Эдуард Александрович – кандидат химических наук, доцент кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», e-mail: Seregin.EA@tversu.ru

ENTHALPY OF FORMATION OF ALDEHYDES. NUMERICAL CALCULATIONS AND MAIN REGULARITIES

M.G. Vinogradova, E.A. Seregin

Tver State University

Working formulas are derived. Numerical calculations of the enthalpy of aldehydes formation are presented. The predictions are done. The results of the calculations are consistent with the experiment. Certain regularities have been identified.

Keywords: *structure, enthalpy of formation, numerical calculations.*