**Расчет энтальпий сублимации ароматических соединений, не способных к межмолекулярному водородному связыванию, в широком диапазоне температур**

***Балахонцев И.С*.**

*Студент, 5 курс специалитета*

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

*E-mail: jsyoutub@gmail.com*

Данные о термохимии сублимации в широком диапазоне температур представляют интерес при расчёте давления паров и тепловых балансов. Измерение энтальпии сублимации тяжелолетучих органических соединений является нетривиальной процедурой. В зависимости от объекта и доступного оборудования, эксперимент проводится при различных температурах, что осложняет сравнительный и критический анализ литературных величин. Сравнить значения энтальпий сублимации можно, используя термохимический закон Кирхгофа, для которого требуется знание теплоемкостей кристаллической и газовой фазы. Данные по теплоемкостям доступны только для узкого круга хорошо изученных соединений, а определение этих величин является отдельным исследованием. Наиболее популярным полуэмпирическим способом определения температурной зависимости энтальпии сублимации является схема Чикоса и его коллег, предсказывающая разность теплоемкостей кристаллической и газовой фазы. Для расчёта разности теплоёмкостей используется линейная корреляция с теплоёмкостью кристалла при 298.15 К. Она обладает рядом недостатков, например, разность теплоёмкостей кристаллической и газовой фазы зависит от температуры, тогда как в модели разность считается постоянной величиной.

В этой работе предложен альтернативный способ расчёта энтальпии сублимации как функции температуры для ароматических соединений, не способных к образованию межмолекулярных водородных связей. Мы объединили ранее разработанные в нашей лаборатории модели для предсказания температурных зависимостей энтальпии испарения по молекулярной структуре [1] и энтальпии плавления по данным калориметрии растворения [2]. Для проверки модели мы собрали 181 значение энтальпий сублимации для 38 ароматических соединений. Сопоставив рассчитанные значения с литературными данными среднеквадратичное отклонение после критического анализа составило 1.4 кДж/моль.

В итоге была разработана модель, позволяющая получить надёжные, согласованные с другими термохимическими величинами данные о температурной зависимости энтальпии сублимации ароматических соединений, неспособных к образованию межмолекулярных водородных связей. Для расчёта требуются только легко определяемые характеристики соединения, такие как энтальпия растворения, энтальпия плавления при температуре плавления и молекулярная структура.

**Литература**

1. Yagofarov, M.I., Bolmatenkov, D.N., Solomonov, B.N. Relationship between the vaporization enthalpies of aromatic compounds and the difference between liquid and ideal gas heat capacities // J.Chem.Thermodyn. – 2021. – Т. 158. – C. 106443.

2. Yagofarov, M.I., Solomonov, B.N. Interpolation of the Temperature Dependence of the Fusion Enthalpy of Aromatic Compounds Between 298.15 K and the Melting Temperature. // Int J Thermophys – 2022. – Т. 43 – №. 6. – С. 90.