

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физической химии

КИЛЬЧИЦКАЯ
Евгения Вячеславовна

Термодинамические свойства 4'-циклогексилацетофенона

Дипломная работа

Научный руководитель:
доктор химических наук,
профессор

А.В. Блохин

Допущена к защите
«__» _____ 2018 г.
Зав. кафедрой физической химии
доктор химических наук, профессор

В.В. Паньков

Минск, 2018

РЕФЕРАТ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЫ «ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 4'-ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОФЕНОНА»

Количество страниц: 59, рисунков: 23, таблиц: 17, литературных источников: 25.

Ключевые слова: 4'-ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОФЕНОН, ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОЕМКОСТИ, АДИАБАТИЧЕСКАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ, БОМБОВАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ СГОРАНИЯ, МЕТОД DFT, ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ, РАСЧЕТ ЧАСТОТ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ, ИЗОДЕСМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ.

Дипломная работа посвящена комплексному исследованию термодинамических свойств 4'-циклогексилацетофенона. Экспериментально изучена температурная зависимость теплоемкости вещества в интервале (80 – 370) К, рассчитаны значения стандартных термодинамических функций. Измерена энергия сгорания вещества и определена его стандартная энтальпия образования. Проведена оптимизация геометрии 4'-циклогексилацетофенона и осуществлен расчет частот нормальных колебаний. Рассчитаны термодинамические свойства 4'-циклогексилацетофенона в состоянии идеального газа в интервале (0 – 1000) К. Вычислена стандартная энтальпия образования вещества в газообразном состоянии.

РЕФЕРАТ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЫ «ТЕРМОДИНАМІЧНІЯ ЎЛАСЦІВАСЦІ 4'-ЦЫКЛАГЕКСІЛАЦЭТАФЕНОНА»

Колькасць старонак: 59, малюнкаў: 23, табліц: 17, літаратурных крыніц: 25.

Ключавыя словы: 4'-ЦЫКЛАГЕКСІЛАЦЭТАФЕНОН, ТЭМПЕРАТУРНАЯ ЗАЛЕЖНАСЦЬ ЦЕПЛАЕМІСТАСЦІ, АДЫЯБАТЫЧНАЯ КАЛАРЫМЕТРЫЯ, БОМБАВАЯ КАЛАРЫМЕТРЫЯ ЗГАРАННЯ, МЕТАД DFT, АПТЫМІЗАЦЫЯ ГЕАМЕТРЫІ, РАЗЛІК ЧАСТОТ НАРМАЛЬНЫХ ВАГАННЯЎ, ІЗАДЭСМІЧНІЯ РЕАКЦЫІ.

Дыпломная праца прысвечана комплекснаму даследванню тэрмадынамічных уласцівасцяў 4'-цыклагексілацэтафенона. Эксперыментальна вывучана тэмпературная залежнасць цеплаемістасці рэчыва ў інтэрвале (80 – 370) К, разлічаны значэнні стандартных тэрмадынамічных функцый. Вымерана энергія згарання рэчыва і вызначана яго стандартная энтальпія ўтварэння. Праведзена аптымізацыя геаметрыі 4'-цыклагексілацэтафенона і здзейснены разлік частот нармальных ваганняў. Разлічаны тэрмадынамічныя ўласцівасці 4'-цыклагексілацэтафенона у стане ідэальнага газу ў інтэрвале (0 – 1000) К. Вылічана стандартная энтальпія ўтварэння рэчыва ў газападобным стане.

ABSTRACT OF THE GRADUATE WORK «THERMODYNAMIC PROPERTIES OF 4'-CYCLOHEXYLACETOPHENONE»

Pages: 59, figures: 23; tables: 17, references: 25.

Keywords: 4'-CYCLOHEXYLACETOPHENONE, TEMPERATURE DEPENDENCE OF HEAT CAPACITY, ADIABATIC CALORIMETRY, BOMB CALORIMETRY COMBUSTION, METHOD DFT, GEOMETRY OPTIMIZATION, VIBRATIONAL FREQUENCIES CALCULATION, ISODESMIC REACTIONS.

This graduate work is devoted to the comprehensive study of the thermodynamic properties of 4'-cyclohexylacetophenone. Temperature dependence of heat capacities of the substance under investigation was experimentally studied in the temperature range of (80 – 370) K, the values of standard thermodynamic functions were calculated. The combustion energy of the substance is measured and its standard enthalpy of formation is determined. Geometry optimization and vibrational frequencies calculations of 4'-cyclohexylacetophenone were conducted. The thermodynamic properties of 4'-cyclohexylacetophenone in the ideal gas state in the range (0 – 1000) K were calculated. The standard enthalpy of formation of the substance in the gaseous state was calculated.