

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИЗОМЕРОВ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ

А. А. Крупнов¹, М. Ю. Погосбемян²

Аннотация: Проведен квантово-механический расчет структуры и энергетических характеристик триэтилалюминия $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ (ТЭА), в ходе которого найдены три его изомера. Рассмотрены процессы изомеризации ТЭА, получены соответствующие константы равновесия и равновесный изомерный состав ТЭА. Рассчитаны основные термодинамические свойства (теплоемкость, энтальпия образования, энтропия и приведенная энергия Гиббса) найденных изомеров и равновесного состава в широком диапазоне температур. Проведена аппроксимация приведенной энергии Гиббса в соответствии с аналитическим представлением, принятым в справочном издании «Термодинамические свойства индивидуальных веществ» под ред. Л. В. Гурвича.

Ключевые слова: триэтилалюминий; изомеризация; равновесие; термодинамические свойства; квантовая механика

DOI: 10.30826/CE22150412

EDN: RMLQMS

Литература

1. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Шамшин И. О., Стороженько П. А. Кинетика взаимодействия капель триэтилалюминия с перегретым водяным паром: эксперимент, физико-химическая модель и схема химических реакций // Горение и взрыв, 2020. Т. 13. № 3. С. 76–81.
2. Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: В 4-х т. — 3-е изд. — М.: Наука, 1978–1982.
3. Linstrom P. J., Mallard W. G. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. — National Institute of Standards and Technology, 2018. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
4. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian 09. Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc. 2009.
5. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev., 1964. Vol. 36. No. 3B. P. B864–B871.
6. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev., 1965. Vol. 140. No. 4A. P. A1133–A1138.
7. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle–Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B, 1988. Vol. 37. No. 2. P. 785–789.
8. Kendall R. A., Dunning T. H., Harrison R. J. Electron affinities of the first-row atoms revisited. Systematic basis sets and wave functions // J. Chem. Phys., 1992. Vol. 96. No. 9. P. 6796–6806.
9. Крупнов А. А., Погосбемян М. Ю. Энергетические и структурные характеристики начальной стадии самовоспламенения триэтилалюминия в воздухе // Горение и взрыв, 2021. Т. 14. № 4. С. 91–95.
10. Тельной В. И., Рабинович И. Б. Термохимия органических соединений непереходных элементов // Успехи химии, 1980. Т. 49. С. 1137–1173.
11. Smith M. B. The heats of formation of aluminum alkyls and related compounds // J. Organomet. Chem., 1974. Vol. 76. No. 2. P. 171–201.

Поступила в редакцию 05.09.2022

¹НИИ механики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, kroupnov@imec.msu.ru

²НИИ механики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, pogosbekian@imec.msu.ru