ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №6

**Гомолог эгнээний шинж чанарын судалгаа**

***Мэдлэг, чадвар:*** Гомолог эгнээний үүсэхийн энтальпийн зүй тогтолыг илрүүлэх чадвартай болно.

*Даалгавар. Ү*үсэхийн энтальпийн тооцоолол

1. Өгсөн бодисын молекулын байгуулалтын томьёог GaussView программд оруулан, оролтын файл бэлтгэнэ үү.
2. HF/6-31G+ аргаар геометр оптимизаци хийж, энергийг тооцоолно уу.
3. Оптимал геометр дээр хагас эмпирик аргаар давтамжийн тооцоолол хийнэ.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № | **ID** | Гомолог | Муж доторх | Мужаас гаднах |
| 1 | Баярдаваа.Лув | CH4 - C5H12 | C3H8 | C6H14 |
| 2 | Баярмаа.Энх | C3H8 - C7H16 | C5H12 | C8H18 |
| 3 | Бэрцэцэг.Сан | C5H12 - C9H20 | C7H16 | C10H22 |
| 4 | Мөнхнаран.Бул | C2H6 - C6H14 | C4H10 | C7H16 |
| 5 | Намуун.Чин | C4H10 - C8H18 | C6H14 | C9H20 |
| 6 | Одгэрэл.Бат | C6H14 - C10H22 | C8H18 | C5H12 |
| 7 | Халиун.Бол | CH4 C3H8 C5H12 C7H16 C9H20 | C5H12 | C10H22 |

|  |
| --- |
| Нэр\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Огноо \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Сэдэв\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |

Лабораторын тайлангийн хуудас

Зорилго:

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

*Даалгавар.* Гомолог эгнээний үүсэхийн энтальпийн зүй тогтолыг илрүүлэх

* Тооцооны дүнгээс энтальпийн харьцангуй утгыг тодорхойлон, тооцооны дүнг нэгтгэн дараах хүснэгтийг бөглөнө үү.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | Алкан | ΔүүсН(тооцоо) | ΔүүсН(лавлах утга), кЖ⋅моль-1 |
| 1 | CH4 |  | -74.81 |
| 2 | C2H6 |  | -84.68 |
| 3 | C3H8 |  | -103.85 |
| 4 | C4H10 |  | -126.15 |
| 5 | C5H12 |  | -146.44 |
| 6 | C6H14 |  | -198.70 |
| 7 | C7H16 |  | -224.40 |
| 8 | C8H18 |  | -249.90 |
| 9 | C9H20 |  | -274.00 |
| 10 | C10H22 |  | -300.90 |

* Хүснэгтийн өгөгдлийг хэрэглэн ΔүүсН(лавлах)=f(ΔүүсН(тооцоо)) хамаарлын график байгуулна уу.
* Өгсөн муж доторх болон мужаас гаднах утгыг эмпирик тэгшитгэлээр олж харьцангүй алдааг тооцно

Дүгнэлт: