**Предсказание энтальпий образования короткоцепочечных хлороалканов (С10 – С13) из первых принципов**

***Чайкин А.В.1,2, Розов Т.П.1,2, Отлётов А.А.1, Миненков Ю.В.1***

*Студент, 4 курс специалитета*

*1Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН,*  
*Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: artalart.com@gmail.com*

Короткоцепочечные хлороалканы (SCCPs) представляют важный класс замещенных изомерных *n*-алканов, имеющих общую формулу C*x*H2*x*–*y*+2Cl*y* (*x* = 10–13), представители которого нашли широкое применение в качестве антипиренов, пластификаторов, добавок в клеи, краски, резину и т.д. Негативное воздействие этих веществ на окружающую среду и здоровье человека привело к их включению в Стокгольмскую конвенцию о стойких органических загрязнителях в 2017 г. Однако, на данный момент механизмы газофазных превращений с участием SCCPs исследовались сравнительно редко и лишь с помощью теоретических (DFT) методов.

Целью данной работы является получение высокоточных энтальпий образования (Δf*H*) ряда SCCPs, содержащих 3–11 атомов Cl. Для вычислений использовался метод модельных реакций в сочетании с высокоуровневыми квантово-химическими расчетами, основанными на локальном варианте метода связанных кластеров, DLPNO-CCSD(T), с экстраполяцией на предел бесконечного базисного набора (CBS). Для каждого из исследуемых хлороалканов был выполнен тщательный конформационный поиск с использованием программ Balloon, Tinker 8 (MMFF94), CREST (GFN2-xTB, GFN-FF). Модельные реакции были автоматически сгенерированы с помощью разработанной в нашей группе программы.[1,2] В качестве участников реакций были выбраны 20 «опорных» соединений из онлайн базы данных Active Thermochemical Tables (ATcT) с надежно определенными Δf*H*: 8 *n*-алканов (С1–С8) и 12 хлоралканов (С1–С2), различающихся числом и/или положением атомов Cl. Полученные значения Δf*H* сопоставлены с аналогичными величинами, рассчитанными на основе аддитивного метода групповых вкладов Бенсона[3] и с помощью полуэмпирических методов.

*Авторы благодарят Российский Научный Фонд за финансовую поддержку*

*(проект РНФ 24-23-00302)*

**Литература**

1. Minenkova I., Otlyotov A.A., Cavallo L., Minenkov Y. Gas-Phase Thermochemistry of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: An Approach Integrating the Quantum Chemistry Composite Scheme and Reaction Generator // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. Vol. 24. N. 5. P. 3163–3181.

2. Nosach E.A., Rozov T.P., Otlyotov A.A., Minenkov Y. Efficient Reaction-Based Approaches for Gas-Phase Enthalpy of Formation Prediction and Their Application to Large (C32) Polycyclic Aromatic Hydrocarbons // Adv. Theory Simulations. 2024. Vol. 7. P. 2400319.

3. Benson S.W. Thermochemical Kinetics. 2nd Ed. Wiley, 1976.