

Jerzy SKRZYPEK, Anna SZMYD

Katedra Ciężkiej Syntezy Organicznej

TERMODYNAMIKA REAKCJI ALKILOWANIA BENZENU
WYŻSZYMI CHLOROALKANAMI

Przeprowadzono obliczenia zmian wielkości entalpii, entropii, potencjału termodynamicznego i stałych równowagi w reakcjach alkiłowania benzenu pierwszorzędowym chlorkiem decyłu i pierwszorzędowym chlorkiem dodecyłu. Obliczeń dokonano wg metod Saundersa [1] oraz Andersona, Bayera, Watsona [2] polegających na sumowaniu "udziałów" grup atomów i wiązań tworzących cząsteczkę związku organicznego.

Pierwszy cykl obliczeń obejmował wyznaczenie wielkości termodynamicznych dla procesu przebiegającego w fazie gazowej (warunki standardowe), drugi dla fazy ciekłej. Obliczenia dla fazy ciekłej były bardziej skomplikowane i obarczone większym błędem.

Końcowe zestawienie wyników zamieszczamy poniżej.

Tablica 1

Zmiana wielkości termodynamicznych podczas reakcji alkiłowania wyższymi chloroalkanami (faza ciekła)

Lp	Reakcja	ΔH_{298}° (c) kcal/mol	ΔS_{298}° (c) kcal/mol °K	ΔG_{298}° (c) kcal/mol	K_{298}
1	$C_6H_6 + CH_3-(CH_2)_8-CH_2Cl$ $\rightarrow C_{10}H_{21}-C_6H_5 + HCl$	- 4,4 (-18418) J/mol	+ 19,4 (+ 81) J/mol deg	- 17,9 (-74929) J/mol	$1,4 \cdot 10^{13}$

cd. tablicy 1

Lp.	Reakcja	ΔH_{298}° (c) kcal/mol	ΔS_{298}° (c) cal/mol °K	ΔG_{298}° (c) kcal/mol	K_{298}
2	$C_{10}H_{21}-C_6H_5+CH_3-$ $-(CH_2)_8-CH_2Cl$ $\rightarrow C_{10}H_{21}-C_6H_4-$ $-C_{10}H_{21}+HCl$	- 3,8 (- 15907) J/mol	+ 12,4 (+ 52) J/mol deg	- 14,8 (- 61953) J/mol	$7,4 \cdot 10^{10}$
3	$C_6H_6+CH_3-(CH_2)_{10}-$ $-CH_2Cl$ $\rightarrow C_{12}H_{25}-C_6H_5+HCl$	- 4,8 (- 20093) J/mol	+ 11,6 (+ 49) J/mol deg	- 14,7 (- 61534) J/mol	$6,2 \cdot 10^{10}$
4	$C_{12}H_{25}-C_6H_5+CH_3-$ $-(CH_2)_{10}-CH_2Cl$ $\rightarrow C_{12}H_{25}-C_6H_4-$ $-C_{12}H_{25}+HCl$	- 2,5 (- 10465) J/mol	+ 9,9 (+ 41) J/mol deg	- 12,0 (- 50232) J/mol	$6,5 \cdot 10^8$

LITERATURA

- [1] Souders M., Matthews C., Hurd C.: Ind.Eng.Chem. 41, 1037, 1048 (1949).
- [2] Anderson J.W., Bayer G.H., Watson K.M.: Nat.Petrol.News,Tech. Sec. 36, R.476 (5.VII.1944).

ТЕРМОДИНАМИКА АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА
ВЫСШИМИ АЛКИЛХЛОРИДАМИ

THERMODYNAMIC DATA OF THE ALKYLATION OF BENZENE
WITH HIGHER ALKYL CHLORIDES