

Lühikokkuvõte

Võrreldi viite gruppi puhaste ainete aururõhu katselisi ning arvutuslikke andmeid. Analüüsi järgmisi aineklasse: fenüülalkoholid, indanoolid, bensüülalkoholid, kumariinid ning bensoaadid. Aururõhu mõõtmised olid aluseks, et välja selgitada, millistele ainetele on võimalik rakendada uuritud kolme grupi kontributsioonide aururõhu arvutuslikke meetodeid. Aururõhkude katsed tehti seadmega DSC igale puhtale ainele võimalikult laias rõhu piirkonnas. Katseandmed esitati Antoine või Clausius-Clapeyroni konstantidega. Lisaks arvutati igale puhtale ainele aurustumisentalpia, ekstrapoleeritud keemispunkt, aururõhk 298.15 K juures ning võimalusel viidi läbi võrdlus kirjandusandmetega.

Kolme erineva grupi kontributsioonide rakendamisel selgus, et väga olulist rolli mängib nende meetodite juures normaal keemispunkt. Keemispunkt oli sisendiks, mille põhjal arvutati spetsiaalse programmiga aururõhu väärtused struktuuri põhjal. Kõigile viiele ainerühmale arvutati aururõhud mõõdetud/ekstrapoleeritud keemispunktiga ning struktuuri põhjal arvutatud väärtusega ning võrreldi saadud tulemusi.

Selgus, et fenüülalkoholidele aururõhu grupi kontributsiooni meetodid olid täpsemad kui sisendiks oli struktuuripõhine (Y. Nannoolal) (S. E. Stein) keemispunkti. 4-fenüül-1-butanoolile, 5-fenüül-1-pentanoolile ning 8-fenüül-1-oktanoolile arvutas täpseimad aururõhud Mydral, Yalkowsky (P.B.Mydral, 1997) meetod. Keskmise suhteline viga kolme meetodi ning üle temperatuuri piirkonna oli 4.81%.

Indanoolide ainegrupil näitas väga täpseid arvutatud aururõhkusi Nannoolal, Rarey, Ramjugernath (Y.Nannoolal, 2008) meetod. 1-indanoolile oli suhteline viga 2.41%, suurema täpsusega oli sama meetod 2-indanoolile, andes veaks ainult 1.20%. 5-indanoolile ükski meetod täpsust üle 30% ei näidanud. Kuna tegemist on isomeeridaga ei suuda grupi kontributsiooni meetodid OH rühma asetust arvesse võtta. Pole teada, millise asetuse korral meetodid kehtivad, seega ei saa väita, et katseline osa oli üleliigne ning grupi kontributsioonide meetodid on indanoolide grupile sobilikud.

Bensüülalkoholidele näitas suurimat täpsust samuti Nannoolal, Rarey, Ramjugernath (Y.Nannoolal, 2008) meetod. 2-(3-hüdroksüfenüül)etanoolile ning 2-

hüdrosüphenetüülalkoholile olid vastavad suhtelised vead 1.34% ning 4.22%. 3-hüdrosübensüülalkoholile ükski uuritud meetod ei kehtinud. Sarnaselt indanoolidele ei saa väita, et kahe OH rühmaga ainetele katselised aururõhu mõõtmised saaks asendada grupikontributsioonide meetoditega.

Kumariinidele ja bensoaatidele ükski vaatluse all olev aururõhu arvutusmeetod piisavat täpsust ei näidanud. Kumariinide suurim keskmine täpsus ühe meetodi kohta oli 23% ning bensoaatidel 20%. Taoliste ainete struktuuride korral tuleks kasutada siiski katselist määramist. Põhjuseks pakutakse keerulisem molekuli struktuuri kui teistel uuritud ainetel.

Tähelepanuväärne on ka meetodite suurem täpsus atmosfäärirõhu või kõrgemate temperatuuride korral. Taoline nähtus võib tuleneda grupi kontributsioonide algandmete vähesusest madalamatel rõhkudel.

Võttes kokku kogu uurimuse leiab autor, et uuritud fenüülalkoholidele on võimalik asendada katseline aururõhu määramine arvutuslikuga. Kõikidele teistele aine rühmadele on vajalik katselise osa läbi viimine.

