

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физической химии

ЖЕРДЕЦКАЯ
Александра Руслановна

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ТИОКСАНТОНА В КОНДЕНСИРОВАННОМ И ГАЗООБРАЗНОМ
СОСТОЯНИЯХ

Дипломная работа

Научный руководитель:
доктор химических наук,
профессор А.В. Блохин

Допущена к защите

«__» _____ 2023 г.

Зав. кафедрой физической химии

доцент, кандидат химических наук А. Е. Усенко

Минск, 2023

РЕФЕРАТ

Дипломная работа в объеме 54 страниц содержит 5 рисунков, 5 таблиц, 2 приложения, 39 источников.

Ключевые слова: ТИОКСАНТОН; КАЛОРИМЕТРИЯ; ТЕПЛОЕМКОСТЬ; ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ; GAUSSIAN 09; КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ; ИЗОДЕСМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ.

Объект исследования – термодинамические свойства тиоксанта.

Цель работы: выполнить комплексное термодинамическое исследование тиоксанта с использованием эмпирических и полуэмпирических методов и проанализировать полученные результаты.

Работа объединяет экспериментальное и теоретическое исследование термодинамических свойств тиоксанта в конденсированном и газообразном агрегатных состояниях. Получены следующие результаты:

- Составлена группа ИДР для тиоксанта и с использованием композитного квантово-химического метода рассчитана энтальпия образования исследуемого вещества в состоянии идеального газа.

- Методами статистической термодинамики рассчитаны стандартные термодинамические функции тиоксанта в состоянии идеального газа в температурном интервале (0 – 1000) К.

- Методом адиабатической калориметрии определена температурная зависимость теплоемкости тиоксанта в интервале (80 – 370) К.

- На основании температурной зависимости теплоемкости тиоксанта рассчитаны его стандартные термодинамические функции в том же температурном интервале.

Определение термодинамических свойств тиоксанта имеет большую актуальность для различных областей науки и может иметь важное практическое применение. Результаты данной работы могут использоваться в решении задач по расчету химических равновесий и оценке принципиальной возможности протекания химических реакций с участием исследуемого вещества: тиоксанта.