

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

Алейникова Александра Андреевна

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ ЭТИ-
ЛОВОГО ЭФИРА 2-ЦИАНО-[2-ФУРАН] АКРИЛОВОЙ КИС-
ЛОТЫ В РАЗЛИЧНЫХ АГРЕГАТНЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Магистерская диссертация
специальность 1-31 80 06 «Химия»

Научный руководитель:
Блохин Андрей Викторович
доктор химических наук,
профессор

Допущена к защите

« ____ » _____ 2023 г.

Зав. кафедрой физической химии
кандидат химических наук, доцент

А.Е. Усенко

Минск, 2023

Аннотация

Магистерская диссертация в объеме 61 страницы содержит 17 рисунков, 11 таблиц, 2 приложения, 30 источников.

Ключевые слова: ЭТИЛОВЫЙ ЭФИР 2-ЦИАНО-3-[4-(4-МЕТИЛФЕНИЛ)-2-ФУРАН] АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ; ЭТИЛОВЫЙ ЭФИР 2-ЦИАНО-3-[5-(2-НИТРОФЕНИЛ)-2-ФУРАН] АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ; КАЛОРИМЕТРИЯ; ТЕПЛОЕМКОСТЬ; ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ; КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ.

Объект исследования – производные этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты.

Предмет исследования – термодинамические свойства данных веществ.

Цель и задачи исследования. Цель настоящей магистерской диссертации выполнить комплексное термодинамическое исследование производных этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты с использованием эмпирических и полуэмпирических методов и проанализировать полученные результаты. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

– Методом адиабатической калориметрии определены температурные зависимости теплоемкостей производных этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты в интервале (80 – 370) К.

– На основании температурной зависимости теплоемкостей производных этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты рассчитаны их стандартные термодинамические функции в том же температурном интервале.

– Составлена группа ИДР для этилового эфира 2-циано-3-[4-(4-метилфенил)-2-фуран] акриловой кислоты и с использованием композитного квантово-химического метода рассчитана энтальпия образования этилового эфира 2-циано-3-[4-(4-метилфенил)-2-фуран] акриловой кислоты в состоянии идеального газа.

– Методами статистической термодинамики рассчитаны стандартные термодинамические функции производных этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты в состоянии идеального газа в температурном интервале (0 – 1000) К.

Результаты данной работы могут найти применение в решении задач оптимизации процесса производства производных этилового эфира 2-циано-[2-фуран] акриловой кислоты.