

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 5-(2-ОКСИМЕТИЛ-4-НИТРОФЕНИЛ)-ФУРАН-2-КАРБАЛЬДЕГИДА В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

М. Р. Сысоенков, А. А. Алейникова

maxim.s.chem@gmail.com, sashaleinikova@gmail.com;

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

Производные фурана являются биологически активными соединениями, что актуализирует необходимость определения термодинамических свойств данного класса соединений. В настоящей работе представлено исследование термодинамических свойств 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида в конденсированном состоянии. Полученные данные могут использоваться при решении задач оптимизации производственных процессов.

Ключевые слова: термодинамические свойства; 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегид; арилфурфураны; адиабатическая калориметрия; теплоёмкость.

ВВЕДЕНИЕ

5-(2-Оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегид относится к арилфурфуранам, т. е. органическим соединениям, в структуре которых есть бензольное кольцо и альдегидная группа, присоединённые к гетероциклическому фурановому кольцу. Арилфурановые производные применяются, в частности, в качестве антибактериальных средств, как ингибиторы ВИЧ-1 протеаз, для модификации хитозана с целью увеличения его растворимости и спектра применимости хитозана как антимикробного и антифунгального средства [1, 2, 3].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

5-(2-Оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегид был получен по реакции Меервейна. Для подтверждения структуры образца использовались методы ЯМР-спектроскопии. Чистота образца проверялась методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием и подтверждалась результатами газового анализа продуктов сгорания во время калориметрических исследований.

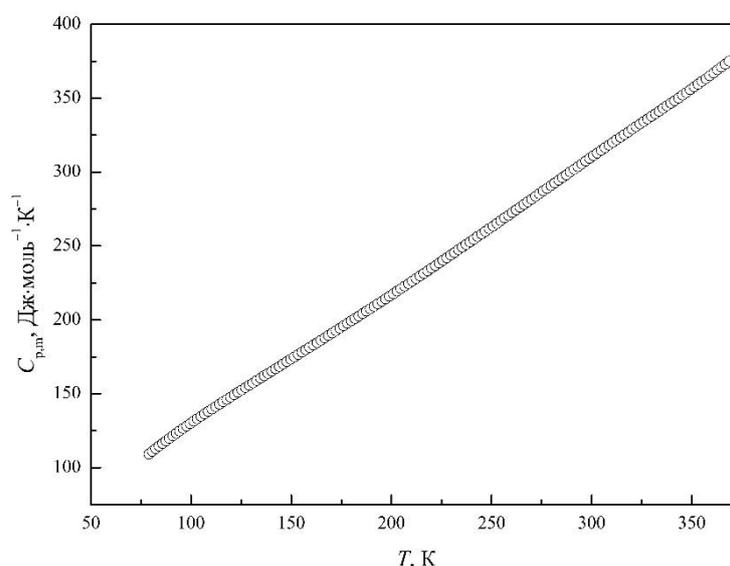
Методом адиабатической калориметрии была получена температурная зависимость теплоемкости 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида в интервале (80–370) К (рис.). Измерения проводились в автоматизированном вакуумном адиабатическом калориметре ТАУ–10 (изготовленном в АОЗТ «Термис», г. Менделеево Московской области), описанном ранее в [4]. Погрешность определения

теплоемкости в температурном интервале (80 – 370) К не превышает $\pm 0,4$ %.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Сглаженные значения стандартных термодинамических функций (теплоемкости, энтропии, приведенной энтальпии и приведенной энергии Гиббса) 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида в интервале (80–370) К приведены в Таблице.

На основании температурной зависимости теплоёмкости 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида впервые были рассчитаны его стандартные термодинамические функции в конденсированном состоянии в том же температурном интервале.



Температурная зависимость теплоемкости 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида

Сглаженные значения стандартных термодинамических функций 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида в температурном интервале (80 – 370) К

Т, К	$C_{p,m}^o$	$\Delta_{80}^T H_m^o / T$	$\Delta_{80}^T S_m^o$	$-\Delta_{80}^T G_m^o / T$
	Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹			
80	$110,5 \pm 0,4$	0,00	0,00	0,00
90	$120,7 \pm 0,5$	$12,85 \pm 0,05$	$13,61 \pm 0,05$	$0,7598 \pm 0,0030$
100	$130,3 \pm 0,5$	$24,12 \pm 0,10$	$26,83 \pm 0,11$	$2,709 \pm 0,011$

Окончание таблицы

Т, К	$C_{p,m}^o$	$\Delta_{80}^T H_m^o / T$	$\Delta_{80}^T S_m^o$	$-\Delta_{80}^T G_m^o / T$
	Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹			
110	139,3 ± 0,6	34,18 ± 0,14	39,67 ± 0,16	5,488 ± 0,022
120	148,0 ± 0,6	43,31 ± 0,17	52,17 ± 0,21	8,859 ± 0,035
130	156,6 ± 0,6	51,69 ± 0,21	64,35 ± 0,26	12,66 ± 0,05
140	165,1 ± 0,7	59,48 ± 0,24	76,27 ± 0,31	16,78 ± 0,07
150	173,6 ± 0,7	66,81 ± 0,27	87,95 ± 0,35	21,14 ± 0,09
160	182,1 ± 0,7	73,74 ± 0,29	99,45 ± 0,40	25,70 ± 0,10
170	190,6 ± 0,8	80,37 ± 0,32	110,8 ± 0,4	30,44 ± 0,12
180	199,3 ± 0,8	86,73 ± 0,35	121,9 ± 0,5	35,21 ± 0,14
190	207,9 ± 0,8	92,88 ± 0,37	133,0 ± 0,5	40,07 ± 0,16
200	216,8 ± 0,9	98,85 ± 0,40	143,8 ± 0,6	44,98 ± 0,18
210	225,8 ± 0,9	104,7 ± 0,4	154,6 ± 0,6	49,95 ± 0,20
220	234,9 ± 0,9	110,4 ± 0,4	165,4 ± 0,7	54,95 ± 0,22
230	244,1 ± 1,0	116,0 ± 0,5	176,0 ± 0,7	59,98 ± 0,24
240	253,4 ± 1,0	121,5 ± 0,5	186,6 ± 0,7	65,04 ± 0,26
250	262,7 ± 1,1	127,0 ± 0,5	197,1 ± 0,8	70,11 ± 0,28
260	272,1 ± 1,1	132,4 ± 0,5	207,6 ± 0,8	75,20 ± 0,30
270	281,7 ± 1,1	137,8 ± 0,6	218,1 ± 0,9	80,29 ± 0,32
280	291,2 ± 1,2	143,1 ± 0,6	228,5 ± 0,9	85,40 ± 0,34
290	300,7 ± 1,2	148,3 ± 0,6	238,9 ± 1,0	90,51 ± 0,36
298,15	308,5 ± 1,2	152,6 ± 0,6	247,3 ± 1,0	94,68 ± 0,38
300	310,3 ± 1,2	153,6 ± 0,6	249,2 ± 1,0	95,63 ± 0,38
310	319,7 ± 1,3	158,8 ± 0,6	259,5 ± 1,0	100,8 ± 0,4
320	328,9 ± 1,3	164,0 ± 0,7	269,8 ± 1,1	105,9 ± 0,4
330	337,9 ± 1,4	169,1 ± 0,7	280,1 ± 1,1	111,0 ± 0,4
340	347,1 ± 1,4	174,2 ± 0,7	290,3 ± 1,2	116,1 ± 0,5
350	356,5 ± 1,4	179,3 ± 0,7	300,5 ± 1,2	121,2 ± 0,5
360	366,3 ± 1,5	184,3 ± 0,7	310,7 ± 1,2	126,4 ± 0,5
370	376,6 ± 1,5	189,4 ± 0,8	320,9 ± 1,3	131,5 ± 0,5

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках данной работы было выполнено термодинамическое исследование 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида. Полученные результаты могут использоваться при дизайне и синтезе

биологически активных соединений арилфуранового ряда. Также стандартные термодинамические функции 5-(2-оксиметил-4-нитрофенил)-фуран-2-карбальдегида в температурном интервале (80 – 370) К находят применение при моделировании экспериментов с участием данного вещества.

Библиографические ссылки

1. *Duffy J.L. [et al.]*. HIV protease inhibitors with picomolar potency against PI-Resistant HIV-1 by extension of the P₃ substituent // *Bioorganic & medicinal chemistry letters*. 2003. Vol. 13, № 15. P. 2569–2572.
2. *Chethan P.D. [et al.]*. Preparation of substituted quaternized arylfuran chitosan derivatives and their antimicrobial activity // *International journal of biological macromolecules*. 2013. Vol. 59. P. 158–164.
3. *Martins A.F. [et al.]*. Antimicrobial activity of chitosan derivatives containing N-quaternized moieties in its backbone: a review // *International Journal of Molecular Sciences*. 2014. Vol. 15, № 11. P. 20800–20832.
4. *Blokhin A.V., Paulechka Y.U., Kabo G.J.* Thermodynamic Properties of [C₆mim][NTf₂] in the Condensed State // *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2006. V. 51, № 4. P. 1377–1388.