

парциальный вклад 1,4-углерод-углеродных взаимодействий (в алканах, цис- и транс- и через двойную связь в алкенах и диенах) и 1,5-взаимодействий (в диенах) внедряемой CH_3 -группы в соответствующий коэффициент полинома; n , m – соответственно числа инкрементов и параметров 1,4- и 1,5-взаимодействий каждого вида; $Divini_i$ – вклад дивинила в величину соответствующего коэффициента полинома; для полинома степени j $a = 0, 1, 2, 3 \dots j$.

Найдены численные значения параметров для определения коэффициентов полиномов типа $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$, отражающих температурные изменения изобарной теплоемкости, абсолютной энтропии, приведенной энтальпии и приведенной энергии Гиббса сопряженных алкадиенов в газовой фазе.

УДК 541.1:547.512

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ ЦИКЛОПРОПАНОВОГО РЯДА

Волкова Э.С., Писарев П.Н., Гузиков А.Я., Роганов Г.Н.

МО «Могилевский государственный университет продовольствия»
Могилев, Беларусь

По молекулярным и спектральным данным в интервале 298.15–1000 К найдены величины термодинамических функций циклопропилкарбонилхлорида (I), цис- и транс-1,2-дицианоциклопропанов (соответственно II и III), циклопропилметилацетилена (IV), дициклопропилметана (V), 1,2- и 3,3-диметилциклопропенов (VI и VII), 1- и 3-фторциклопропенов (VIII и IX), 1,2- и 3,3-дифторциклопропенов (X и XI), 1,3,3-трифторциклопропена (XII) и 1,2,3,3-тетрафторциклопропена (XIII) для идеального газового состояния веществ. Интерпретация экспериментальных спектров соединений по литературным данным выполнена на основе их анализа, расчетов частот нормальных колебаний и сопоставления со спектрами родственных соединений. Геометрические параметры молекул определены методами микроволновой спектроскопии, газовой электронной дифракции и расчетами *ab initio*. Конформационное состояние I, IV и V изучено спектральными и квантово-механическими методами. В расчетах термодинамических функций этих соединений учтены эффекты смешения стереоизомеров. Полученные для 298.15 К величины абсолютных энтропий и теплоемкостей исследуемых соединений имеют соответственно следующие значения (Дж·моль⁻¹·К⁻¹): 336.12 и 101.55(I), 358.52 и 111.44(II), 330.89 и 103.18(III), 334.46 и 108.91(IV), 361.85 и 132.33(V), 316.67 и 98.98(VI), 304.68 и 101.33

(VII), 270.65 и 62.02 (VIII), 267.95 и 61.14 (IX), 286.75 и 70.73(X), 278.62 и 71.09(XI), 305.32 и 80.87(XII), 320.98 и 90.14(XIII).

С целью прогноза и согласования величин энтальпий образования углеводородных производных циклопропана (газ и жидкость, 298.15 К) разработана аддитивная методика определения этих характеристик, основанная на принципах заместительных процедур с учетом 1,4-внутримолекулярных взаимодействий. Точность расчета находится на уровне экспериментальных погрешностей. Проведено согласование известных экспериментальных значений энтальпий образования.

Обсуждено влияние эффекта сопряжения кратных связей веницилических группировок с циклопропановым кольцом на геометрию и конформационное состояние производных циклопропана. Оценена величина этого эффекта.

УДК 541.1+543.25

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ ПРЯМОГО ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ЖЕЛЕЗА В МУКЕ РЖИ

Рукшан Л.В., Рябая О.Д., Константинов С.Г.

**УО «Могилевский государственный университет продовольствия»
Могилев, Республика Беларусь**

Железо относится к жизненно важным микроэлементам, играющее незаменимую роль в образовании гемоглобина и ряда ферментов. В организм человека оно попадает с различными продуктами питания, в том числе, с хлебом. Содержание железа в муке ржи зависит не только от способов ее обработки, но также и от сорта зерна. В данной работе проводилось исследование возможности применения прямого потенциометрического метода для количественного определения железа. Хотя к рекомендованным для непосредственного потенциометрического определения элементам железо не относится из-за довольно высокой электрохимической активности, нельзя исключать такой возможности для анализа за качеством муки. В более ранних работах нами была показана принципиальная возможность данного метода для количественного определения содержания в растворах некоторых металлов. Поэтому была предпринята попытка использовать данный метод для практического применения на примере муки ржи 3 разных сортов.

Для анализа содержания железа в различных сортах ржи – «сяброука», «зався», «спадчына» вначале проводили «мокрую» минерализацию муки. Для этого по 20 г зерна ржи каждого сорта