

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИАЦЕТИЛЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ И ИХ ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ.

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

Могилевский технологический институт, Беларусь

В продолжение исследований термодинамических свойств соединений ацетиленового ряда в настоящей работе по молекулярным и спектральным данным выполнены расчеты термодинамических характеристик пентадина-1,3 (1), гексадина-2,4 (2), гексадина-1,5 (3), 1-бромгексадина-1,5 (4), 1,6-дибромгексадина-1,5 (5), а также дифторацетилена (6) в идеально-газовом состоянии.

Подобные расчеты проводились ранее только для пентадина-1,3, в данной работе они откорректированы и проведены в более широком температурном интервале.

Совокупность фундаментальных частот для (1)-(6) определены на основе изучения их экспериментальных ИК и КР спектров, расчета частот нормальных колебаний и сравнением их со спектрами родственных соединений.

Исследования методом газовой электронной дифракции, исследования ИК и КР спектров и расчеты методом молекулярной механики ММ2 для соединений (3)-(5) показали, что эти три соединения реализуются в наиболее стабильной плоской транс-конформации и двух энергетически равноценных зеркально-изомерных гош-конформациях каждое.

Произведение моментов инерции вычислено для (1)-(6) на основе структурных параметров, полученных методами газовой электронной дифракции и микроволновой спектроскопии. Для (2) вращение метильных групп принято свободным.

Величины свойств вычислены в интервале 298.15-1000 К, для одной температуры (298.15 К) они приведены в таблице.

Термодинамические свойства диацетиленовых углеводородов
и их галогенпроизводных, Дж·моль⁻¹·К⁻¹ ($\Delta_f H_m^\circ$ и $\Delta_f G_m^\circ$ в кДж·моль⁻¹).

Соединение с	C_p°	S_m°	$(H_m^\circ - H_0^\circ)/T$	Φ_m°	$\Delta_f H_m^\circ$	$\Delta_f G_m^\circ$
1	90.62	295.79	60.27	235.52	405.70	403.90
2	108.32	328.67	72.72	255.94	378.10	407.10
3	113.02	340.18	72.63	267.55	414.30	439.90
4	129.27	390.94	83.83	307.10	---	---
5	134.86	443.96	94.36	349.60	---	---
6	61.32	252.38	46.06	206.31	---	---