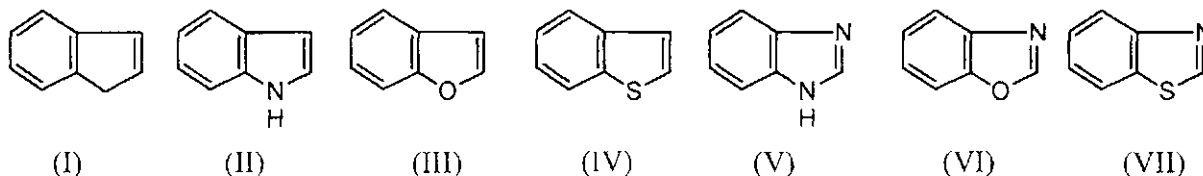


ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ ИНДЕНА В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Александрова Е.Ю., Писарев П.Н.
 Научные руководители – Волкова Э.С., к.фарм.н., доцент,
 Гарист И.В., к.х.н., доцент
 Могилевский государственный университет продовольствия,
 г. Могилев, Республика Беларусь

Наиболее специфические свойства, присущие гетероциклическим соединениям, проявляют ароматические гетероциклы, среди которых в наибольшей мере термодинамически изучены соединения моноциклического строения. В тоже время конденсированные с бензольным ядром и обладающие ароматическим характером гетероциклические соединения функционируют в биохимических системах в составе белковых молекул и витаминов, используются в производстве красителей, лекарственных препаратов, ингибиторов коррозии и т.д., являются ценным сырьем для синтеза целого ряда важных химических соединений.

По известным из литературных источников наборам фундаментальных колебаний на основе экспериментальных ИК, КР спектров и выполненных расчетов *ab initio* (HF/6-31g(d,p)) нами определены величины термодинамических функций шести гетероаналогов индена (I): бензопиррола (II), бензофурана (III), бензотиофена (IV) бензимидазола (V), бензоксазола (VI) и бензотиазола (VII)



в интервале 298.15-1000 К для веществ в состоянии идеального газа. Геометрические параметры молекул определены из кристаллографических и квантовохимических исследований. Число симметрии каждой из молекул принято равным единице.

Результаты расчетов термодинамических функций гетероциклических соединений (II-VII) (идеальный газ, Дж·моль⁻¹·К⁻¹) получены для девяти температур в интервале 298.15-1000 К, в таблице они приведены для температуры 298.15 К:

T, К	C_p^0	S_m^0	$\frac{H_T^0 - H_0^0}{T}$	Φ_m^0	C_p^0	S_m^0	$\frac{H_T^0 - H_0^0}{T}$	Φ_m^0
бензопиррол (II)					бензимидазол (V)			
298.15	121.48	332.56	65.03	267.53	116.21	329.62	62.82	266.80
бензофуран (III)					бензоксазол (VI)			
298.15	114.66	327.84	62.00	265.84	109.40	325.23	60.26	264.97
бензотиофен (IV)					бензотиазол (VII)			
298.15	122.24	340.21	66.46	273.74	116.53	336.96	64.39	272.56

При сопоставлении найденных величин термодинамических функций с известными из литературных источников величинами функций для прототипных моноциклических систем (пиррола, тиофена, фурана, тиазола и оксазола) и величинами свойств гетероциклических соединений сходного строения оценены эффекты, возникающие при замене одного циклического атома на атом другой природы. Полученные оценки эффектов замены для изобарных теплоемкостей, абсолютных энтропий и энтальпий образования (газ, 298,15 К) могут быть использованы для установления закономерностей в моногетероциклических системах и переноса их на соответствующие конденсированные аналоги, для прогнозирования величин термодинамических функций экспериментально не изученных гетероциклических соединений.