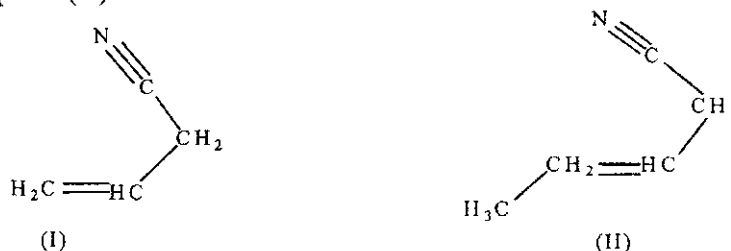


**РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БУТЕН-3-НИТРИЛА
И ТРАНС-ПЕНТЕН-3-НИТРИЛА**

И.В. Гарист, Э.С. Волкова, Г.Н. Роганов

Могилевский государственный университет продовольствия,
г. Могилев, Республика Беларусь

Термодинамические свойства алкилнитрилов известны для небольшого круга соединений, относящихся в основном к насыщенному ряду. По известным из литературных источников совокупностям фундаментальных колебаний на основе экспериментальных ИК, КР спектров и расчетов *ab initio* в различных базисах нами выполнены расчеты величин термодинамических функций бутен-3-нитрила (I) и транс-пентен-3-нитрила (II)



в интервале 298.15-1000 К для веществ в состоянии идеального газа. Геометрические параметры молекул определены методами микроволновой спектроскопии, газовой электронной дифракции и *ab initio*. Конформационное состояние изучено спектральными и квантово-химическими методами. В расчетах термодинамических функций соединений учтены эффекты смешения стереоизомеров. Вклады внутреннего вращения асимметричных волчков в термодинамические функции учтены в колебательной составляющей по торсионным частотам $\tau(\text{C-C})$. Для (I) с использованием функции потенциальной энергии вращения винильной группы

$$V(\varphi) = \sum_{i=1}^6 \frac{V_i}{2} (1 - \cos i\varphi), \text{ где } V_1 = 4.69, V_2 = 1.29, V_3 = 10.49, V_4 = -0.31, V_6 = -0.47$$

кДж·моль⁻¹, найденной величины приведенного момента инерции винильного волчка $I_m(\text{C}_2\text{H}_3) = 12.58 \cdot 10^{-40} \text{ г}\cdot\text{см}^2$, вклад внутреннего вращения продублирован в классическом приближении через сумму состояний и соответствует колебательному вкладу торсионной частоты 149 см⁻¹ из экспериментального спектра.

Результаты расчетов термодинамических функций нитрилов I-II (идеальный газ, Дж·моль⁻¹·К⁻¹), выполненные для девяти температур в интервале 298.15-1000 К, в таблице приведены для 298.15 К:

T, К	C_p°	S_m°	$\frac{H_T^\circ - H_O^\circ}{T}$	Φ_m°	C_p°	S_m°	$\frac{H_T^\circ - H_O^\circ}{T}$	Φ_m°
бутен-3-нитрил (I)					транс-пентен-3-нитрил (II)			
$I_A I_B I_C = 4877.3 \times 10^{-117} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$					$I_A I_B I_C = 23212.2 \times 10^{-117} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$			
298.15	88.67	311.60	59.60	252.00	109.11	335.35	71.99	263.36