

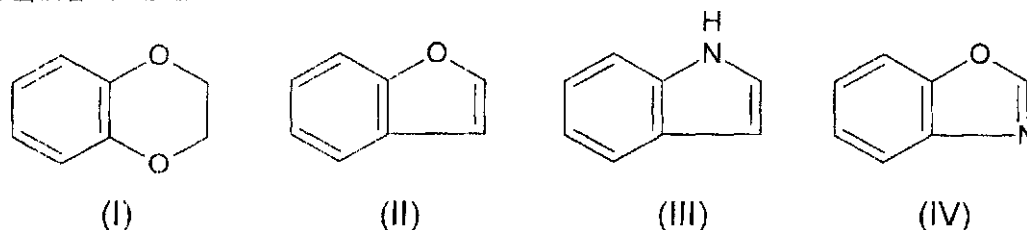
Рисунок – Зависимость активности дрожжевых клеток от продолжительности их обработки в апротонных растворителях

УДК 544.31

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БЕНЗОДИОКСАНА-1,4 И ГЕТЕРОАНАЛОГОВ ИНДЕНА В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Э.С. Волкова, П.Н. Писарев, С.В. Петрова-Куминская, Г.Н. Роганов
УО «Могилевский государственный университет продовольствия»
Могилев, Республика Беларусь

По молекулярным и спектральным данным определены величины термодинамических функций бензодиоксана-1,4 (I), бензофурана (II), бензопиррола (индол) (III) и бензоксазола (IV) в интервале 298.15–1000 К для веществ в состоянии идеального газа. Расчеты выполнены при условии разделения энергии по видам движения.



Бензодиоксан-1,4. Результаты выполненных нами и в работе [1] расчетов *ab initio* в различных приближениях с оптимизацией геометрии молекул и методом молекулярной механики ММЗ показывают, что соединение реализуется в конформации, в которой конденсированный цикл диоксана принимает форму кресла. Вторая конформация, в которой цикл диоксана имеет форму ванны, имеет существенно меньшую энергетическую стабильность ($\Delta E = 34.4 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$) и из-за ничтожно малого содержания ее в равновесной смеси при средних температурах в расчетах не учитывались. Интерпретация колебательных спектров выполнена в [1] на основе анализа экспериментальных ИК-спектров в газовой фазе и спектров КР в жидкости, а также квантово-химических расчетов частот нормальных колебаний. $I_A I_B I_C = 184.12 \cdot 10^{14} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$. Вращательное число симметрии $\sigma = 2$.

Бензофуран, бензопиррол, бензоксазол. Для этих соединений измерены полные инфракрасные и рамановские спектры в газовом и конденсированных агрегатных состояниях. Условное отнесение колебаний и формирование совокупности фундаментальных частот колебаний выполнено в работе [2]. Поскольку сведений об экспериментальных исследованиях геометрических параметров плоских молекул рассматриваемых соединений не обнаружено, величины длин связей и валентных углов определены расчетом *ab initio* в приближении HF/6-31G(d,p). Получены следующие значения произведений моментов инерции молекул ($I_A I_B I_C \cdot 10^{117} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$): (II) 74126.94; (III) 77531.82; (IV) 69331.71. Вращательные числа симметрии $\sigma = 1$. Расчетная энтропия бензофурана при 298.15 К согласована с ее экспериментальной величиной.

Полученные значения термодинамических функций (изобарная теплоемкость, абсолютная энтропия, приведенные энтальпия и энергия Гиббса) соединений при 298.15 К соответственно равны (Дж·моль⁻¹·К⁻¹): (I) 305.09, 236.73, 48.36, 90.12; (II) 114.66, 327.84, 62.00, 265.84; (III) 121.48, 332.56, 65.03, 267.53; (IV) 109.40, 325.23, 60.26, 264.97.

УДК

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ БУТАНДИОЛА-1,4
О.М. Баранов, С.В. Петрова-Куминская, Е.А. Трифонцева, Г.Н. Роганов
 УО «Могилевский государственный университет продовольствия»
 Могилев, Республика Беларусь

Синтез полибутадиентерефталата (ПБТ) – двустадийный процесс. Реакция получения ПБТ из диметилтерефталата (ДМТ) протекает в две стадии:

1. Переэтерификация ДМТ бутандиолом-1,4 (БД); эта реакция протекает при температуре 140-205°C с получением бис-(4-гидроксибутил)-терефталата, олигомерных сложных эфиров терефталевой кислоты и выделением реакционного метанола.

2. Поликонденсация бис-(4-гидроксибутил)-терефталата (температура процесса – 250°C) с выделением «реакционного БД».

На первой стадии процесса из реакционной массы удаляется низкокипящий метанол, а на второй - высококипящий БД. Параллельно с реакцией переэтерификации может протекать побочная реакция внутримолекулярной дегидратации БД, сопровождающаяся образованием тетрагидрофурана (ТГФ). При более высокой температуре (стадия 2) возможны и другие побочные реакции БД: реакция внутримолекулярной дегидратации, приводящая к образованию ненасыщенного спирта – бутен-3-ол-1 и межмолекулярной дегидратации с образованием 1,4-диоксана [1]. Наличие этих примесей в реакционной смеси может оказать негативное влияние на эксплуатационные свойства целевого продукта – ПБТ.

В связи с этим была изучена термическая стабильность БД как в чистом виде, так и с добавками ингредиентов (катализатор, термостабилизатор) в интервале температур, используемых в синтезе ПБТ. Анализ БД и продуктов его термолитиза проводили методом газожидкостной хроматографии и спектроскопии ядерного магнитного резонанса. Колбу, снабженную обратным шариковым холодильником, помещали в термостат (масляная силиконовая баня) и нагревали в интервале 190°C-250°C (шаг нарастания температуры 10°C·час⁻¹). Результаты количественного анализа приведены в таблице 1.

№	Проба	Компонент, %		
		Метанол	ТГФ	БД-1,4
1.	БД-1,4 исходный	0,02	0,04	99,9
2.	190 °С	следы	0,05	99,95
3.	195 °С	следы	0,07	99,93
4.	200 °С	следы	0,06	99,94
5.	205 °С	следы	0,07	99,93
6.	210 °С	следы	0,05	99,95
7.	215 °С	следы	0,09	99,91
8.	220 °С	следы	0,06	99,94
9.	225 °С	–	0,06	99,94
10.	250 °С	–	0,05	99,95

УДК

МЕТОД ОЧИСТКИ РЕАКЦИОННОГО БУТАНДИОЛА-1,4
Г.Н. Роганов, О.М. Баранов, О.В. Дудинская, Л.Г. Столярова
 УО «Могилевский государственный университет продовольствия»
 Могилев, Республика Беларусь

Полибутадиентерефталат (ПБТ), как и полиэтилентерефталат (ПЭТ) является в настоящее время многотоннажным химическим продуктом благодаря комплексу ценных эксплуатационных свойств (высокая прочность, жесткость, твердость, высокие диэлектрические и антифрикционные показатели). ПБТ находит обширные сферы применения в электротехнической, радиоэлектронной и машиностроительной промышленности как конструкционный и декоративный пластик. Основными