**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУРАНА В ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ**

Собечко И.Б., Величковская Н.И., Кос Р.В., Маршалек А.С., Четвержук Я.А., Ван-Чин-Сян Ю.Я.

*Национальный университет “Львовская политехника”, Украина,79013 г.Львов, E-mail:* *phys.chem.lp@gmail.com*

Производные фурана, используются в качестве исходных веществ при синтезе биологически активных соединений. Как известно, синтез и дальнейшую очистку полученных веществ проводят в органических растворителях, природа которых при этом играет существенную роль. Для характеристики взаимодействия компонентов в растворе используют термодинамические функции, а именно, по величине энтальпии растворения (ΔsolH) судят о степени взаимодействия компонентов раствора, а по изменению энтропии (ΔsolS) – о степени разупорядочения системы.

Энтальпию и энтропию растворения 3-(2-фурил)-2-пропеновой кислоты (I), 2-фурил-2-циано-2-пропенамида (II) и этил-2-циано-3-(2-фурил)-2-пропеноата (III) в насыщенных растворах определяли по температурной зависимости их растворимости в органических растворителях с различной полярностью.

(І) (ІІ)  (ІІІ)

Исследованные вещества получали взаимодействием фурфурола с малоновой кислотой в присутствии пиридина (I); с цианоацетамидом в присутствии триэтиламина (II); с цианоуксусным эфиром в присутствии пиперидина (III). Полученные кристаллические вещества очищали трехкратной перекристаллизацией из смеси этанол –диметилформамид.

В качестве растворителей использовали бензол (БЗ), ацетонитрил (АН), диметилкетон (ДК) и *изо*-пропанол (*и*-ПР). Перед проведением опытов растворители очищали фракционной перегонкой с последующей идентификацией по показателю преломления; методом газожидкостной хроматографии установлено наличие в них не более 0,1%, масс примесей.

Растворение веществ проводили в герметичном стеклянном сосуде с тефлоновой мешалкой и термометром. Температуру воды в термостате поддерживали с точностью ±0,1 град. Скорость вращения мешалки составляла 50 об/мин., при этом вся твердая фаза находилась во взвешенном состоянии. В предварительных опытах установлено, что при выбранном режиме перемешивания во всех растворителях ощутимые изменения растворимости исчезают через 40-45 мин. Во всех последующих опытах насыщение растворов проводили в течении 60 минут при постоянном перемешивании.

При помощи пипетки с поршнем отбирали пробы (сериями из 2-3 образцов) и переносили в бюксы, предварительно взвешенные с точностью ±0,0002г. Бюксы быстро закрывали и взвешивали, определяя, таким образом, массу насыщенного раствора. После взвешивания бюксы приоткрывали и ставили сушиться до постоянной массы в термошкаф с температурой 333-343К. После сушки взвешивали массу сухого остатка кислоты и рассчитывали ее мольную долю. Для подтверждения установления равновесия опыты проводили как в режиме повышения температуры, так и в режиме ее понижения; отсутствие петли гистерезиса на кривой температурной зависимости растворимости убеждает в достижении равновесия.

Экспериментальные данные обрабатывали методом наименьших квадратов по линейной форме уравнения Шредера и представлены в таблице

lnN2= - ΔsolH/RT + ΔsolS/R

где: А = ΔsolS/R, В = ΔsolH/R. Все погрешности наведены для уровня значимости 0,95.

Термодинамические параметры растворимости исследованных веществ в органических растворителях

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Раств. | Интервал | A | - B | n | ΔsolHкДж/моль | ΔsolSДж/мольK |
| Темпер.,К | Конц.,*х*·102 |
| 3-(2-фурил)-2-пропеновая кислота (I) |
| АН | 277,4-323,2 | 0,60-4,40 | 3567±36 | 8,00±0,12 | 51 | 29.66±0.30 | 66.5±1.0 |
| БЗ | 288,5-325,1 | 0,43-3,50 | 4866±58 | 11,59±0,19 | 33 | 40.46±0.48 | 96.4±1.6 |
| ДК | 275,6-322,5 | 5,58-15,71 | 2012±32 | 4,27±0,11 | 39 | 16.73±0.27 | 35.50±0.87 |
| *и*-ПР | 275,6-322,4 | 3,60-12,93 | 2635±54 | 6,15±0,18 | 36 | 21.91±0.45 | 51.1±1.5 |
| 2-фурил-2-циано-2-пропенамид (II) |
| АН | 297,4-323,5 | 2,84-6,84 | 3247±97 | 5,02±0,31 | 39 | 26.99±0.81 | 41,7±2,6 |
| БЗ | 307,5-335,0 | 0,20-0,39 | 2519±237 | 2,04±0,74 | 33 | 20,9±2,0 | 17,0±6,1 |
| ДК | 279,5-312,7 | 1,13-4,06 | 2556±82 | 4,69±0,27 | 48 | 21,25±0,68 | 39,0±2,2 |
| *и*-ПР | 293,0-327,5 | 0,20-1,57 | 5490±163 | 12,57±0,53 | 38 | 45,6±1,4 | 104,5±4,4 |
| этил-2-циано-3-(2-фурил)-2-пропеноат (III) |
| АН | 265,0-304,5 | 2,01-11,95 | 3726±118 | 10,05±0,72 | 37 | 30,97±0,98 | 83,6±3,4 |
| БЗ | 277,0-309,5 | 3,17-14,75 | 4534±217 | 11,57±0,72 | 32 | 37,7±1,8 | 96,2±6,0 |
| ДК | 252,0-305,6 | 2,47-11,05 | 2369±132 | 5,67±0,49 | 50 | 19,7±1,1 | 47,1±4,1 |
| *и*-ПР | 278,2-329,6 | 0,19-5,73 | 6001±217 | 15,30±0,73 | 39 | 49,9±1,8 | 127,2±6,1 |

n-количество экспериментальных точек

Термодинамические параметры растворимости, представленные в таблице, характеризуют не только процесс образования раствора (смешение компонентов), но и фазовый переход кристаллической веществ в жидкую фазу раствора.

Довольно высокие значения параметров растворения исследуемых веществ в полярных растворителях связано с их способностью образовывать водородные связи с растворителем.