

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ, РАСЧЕТНЫЕ И КОМБИНИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Руслан Наильевич Нагриманов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: rnagrimanov@gmail.com

Ключевые слова: фазовые переходы, энтальпия образования, давление пара, калориметрия растворения, энтальпия сольватации.

Термохимические свойства фазовых переходов имеют важное фундаментальное и прикладное значение. Эти параметры необходимы для расчета тепловых эффектов химических реакций, энергии внутри- и межмолекулярных взаимодействий, энергии образования в газовой фазе, а также для развития квантово-химических расчетов. Большинство экспериментальных методов определения термодинамических параметров фазовых переходов применимо только для хорошо летучих соединений (>1 кПа) [1].

В настоящей работе разрабатываются методы определения энтальпии фазовых переходов органических соединений, основанные на методе калориметрии растворения. В основе этого метода лежит экспериментальное определение энтальпии растворения и расчет энтальпии сольватации. Если растворяемое вещество и растворитель образуют растворы, близкие по свойствам к идеальным, то рассчитанная энтальпия сольватации будет равна энтальпии испарения с обратным знаком.

Полученные значения термохимических свойств фазовых переходов проверялись с использованием метода сверхбыстрой калориметрии и транспирации. Использование независимых методов определения термохимических величин фазовых переходов позволило существенно повысить достоверность результатов, полученных методом калориметрии растворения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00253.

Список литературы

1. *Verevkin S.P. Development of Direct and Indirect Methods for the Determination of Vaporization Enthalpies of Extremely Low-Volatile Compounds / S.P. Verevkin, D.H. Zaitsau, C. Schick, F. Heym // Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry / ed. by S. Vyazovkin, N. Koga, C. Schick. – Elsevier Science B.V., 2018. – P. 1–46.*