

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАСИЧЕНИХ РОЗЧИНІВ МЕТИЛ 6-МЕТИЛ-4-(4-МЕТИЛФЕНІЛ)-2-ОКСО-1,2,3,4- ТЕТРАГІДРОПІРИМІДИН-5- КАРБОКСИЛАТУ В ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ

¹О.Р. Клачко, аспірант, ¹І.Б. Собечко, к.х.н., докторант ²В.С. Матійчук, д.х.н., доцент
¹В.В. Сергеев, д.х.н., професор, ³Н.І. Тищенко наук. співробітник

¹Національний університет «Львівська політехніка»,
пл. Св. Юра, 3/4, 79013 Львів, Україна,
phys.chem.lp@gmail.com

²Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

³Відділ фізико-хімії і технології наноструктурної кераміки та нанокомпозитів
Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАНУ
вул. Кржижановського, 3, 03142 Київ, Україна

Подано новий експериментальний матеріал з визначення розчинності та термодинамічних параметрів процесу розчинення дигідропіримідину, який проявляє широкий спектр біологічної активності, у ряді органічних розчинників.

За температурною залежністю розчинності метил 6-метил-4-(4-метилфеніл)-2-оксо-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилата у ряді розчинників розраховано величини ентальпії та ентропії розчинення. З урахуванням величини ентальпії плавлення, визначеної за даними диференційно-термічного аналізу та перерахованої до 298 К, пораховано ентальпії й ентропії змішування при 298 К. З'ясовано вплив розчинника на розчинність і величини ентальпії й ентропії змішування за 298 К.

Матеріал буде корисним для фармацевтичної та харчової галузей промисловості для яких важливим є оптимізація процесів синтезу та очищення індивідуальних біологічно активних речовин високого ступеня чистоти.

Таблиця 1

Термодинамічні параметри розчинності метил 6-метил-4-(4-метилфеніл)-2-оксо-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилата в органічних розчинниках за 298К

Розчинники	$\Delta_{sol}H^{\circ}$	$\Delta_{mix}H^{\circ}$	$\Delta_{sol}S^{\circ}$	$\Delta_{mix}S^{\circ}$
	кДж/моль		Дж/моль·К	
Ацетонітрил	30,20±0,52	-0,2±2,0	38,7±1,7	-17,0±2,8
Етилацетат	27,6±1,0	-2,8±2,1	36,0±3,3	-19,7±4,0
2-Пропанол	36,33±0,52	5,9±2,0	63,5±1,7	7,8±2,8
2-Пропанон	22,60±0,45	-7,8±1,9	23,9±1,2	-31,8±2,5

Таблиця 2

Ентальпії плавлення зразків метил 6-метил-4-(4-метилфеніл)-2-оксо-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилата

m_0 , г	Δm_{vap} , г	S , К·с	q_{vap} , Дж	$\Delta_{fus}H_{Tfus}$	$\Delta_{fus}H_{298}$	$\Delta_{fus}S_{Tfus}$	$\Delta_{fus}S_{298}$
				кДж/моль		кДж/моль	
$T_{fus} = 487,1 \pm 1,0 \text{ К}; K = 0,04329 \text{ Дж/К} \cdot \text{с}$							
0,0178	0,0003	69,0	0,0852	42,5	30,3	87,3	55,5
0,0532	0,0013	210,5	0,3814	42,7	30,4	87,7	55,8
Середнє значення:				42,6 ± 1,8	30,4 ± 1,9	87,5 ± 2,1	55,7 ± 2,2