

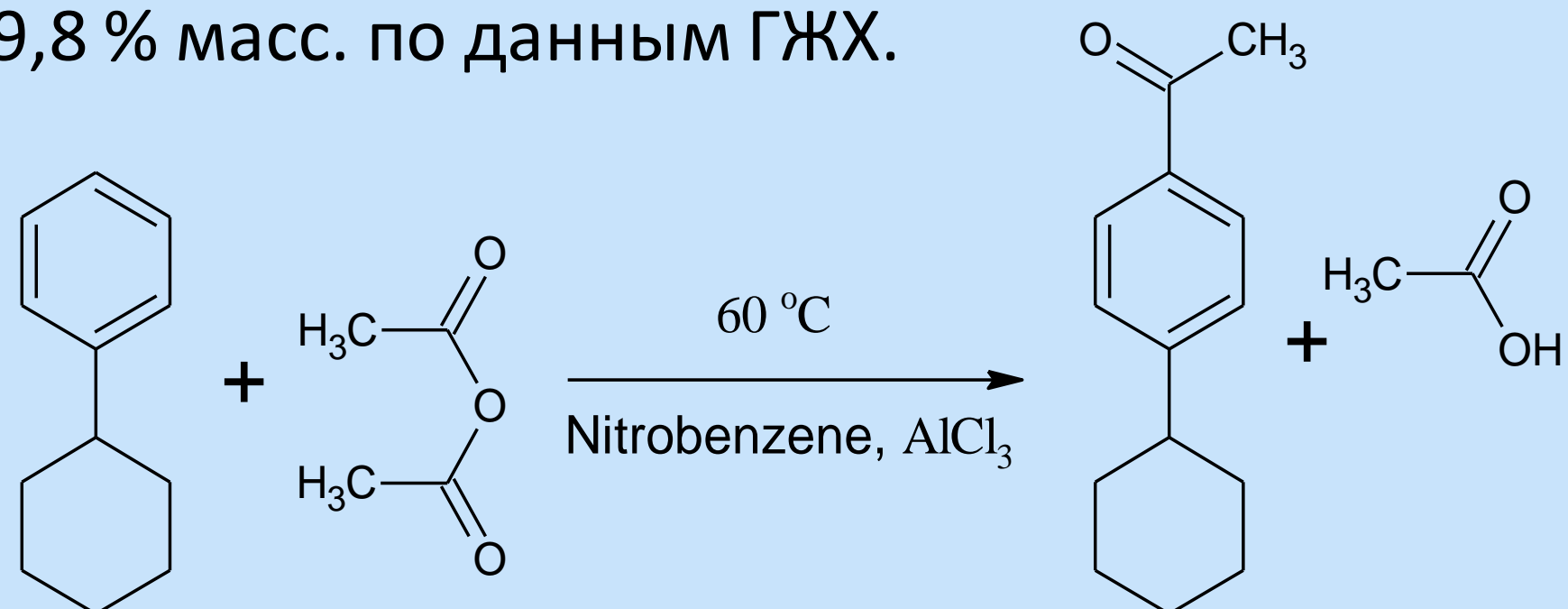
# ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ПАРАМЕТРЫ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ 4'-ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОФЕНОНА В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ

О.В. Контява, А.В. Блохин, М.Б. Черепенников

Белорусский государственный медицинский университет  
Химический факультет Белорусского государственного университета  
voi-olga@mail.ru

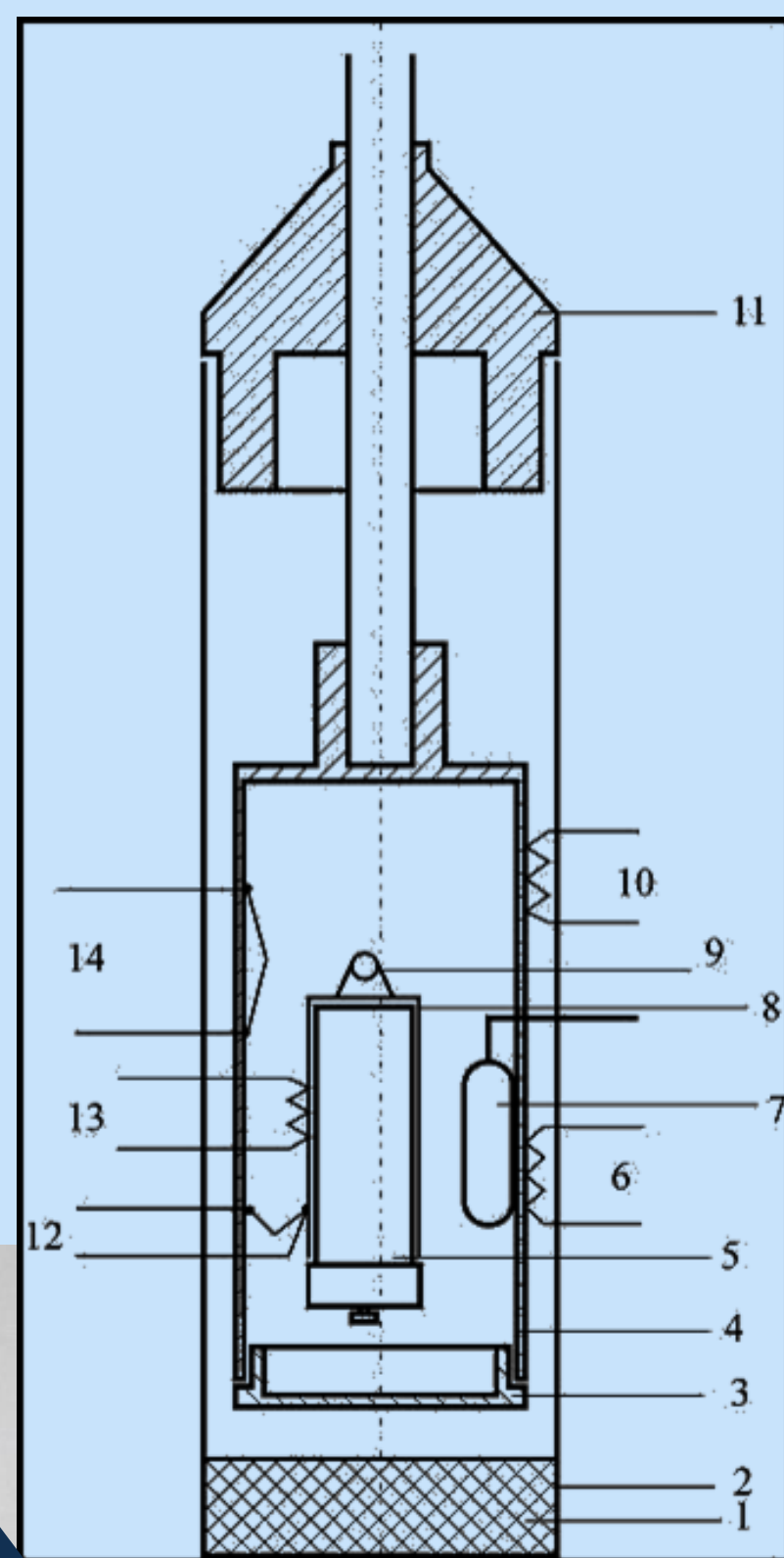
## Образец

4'-ЦИКЛОГЕКСИЛАЦЕТОФЕНОН ( $M = 202,2914$  г моль<sup>-1</sup>) синтезирован ацелированием циклогексилбензола уксусным ангидридом в среде нитробензола с использованием в качестве катализатора хлорида алюминия. Очистка полученного продукта выполнена многократной перекристаллизацией из этилового спирта. Подготовленный образец имел чистоту более 99,8 % масс. по данным ГЖХ.



## Измерения

### Адиабатический калориметр ТАУ-10



Температурный интервал измерения: (5 – 370) К;  
Погрешность: < 2 % - ниже 20 К,  
0,4 % - (20 – 370) К



## Расчет параметров фазовых переходов

Молярная энтальпия плавления рассчитана по уравнению:

$$\Delta_{пл} H_m^{\circ} = Q - Q_1 - Q_2 = Q - \int_{T_{жч}}^{T_{пл}} C_{p,m}(кр I) dT - \int_{T_{пл}}^{T_{жч}} C_{p,m}(ж) dT$$

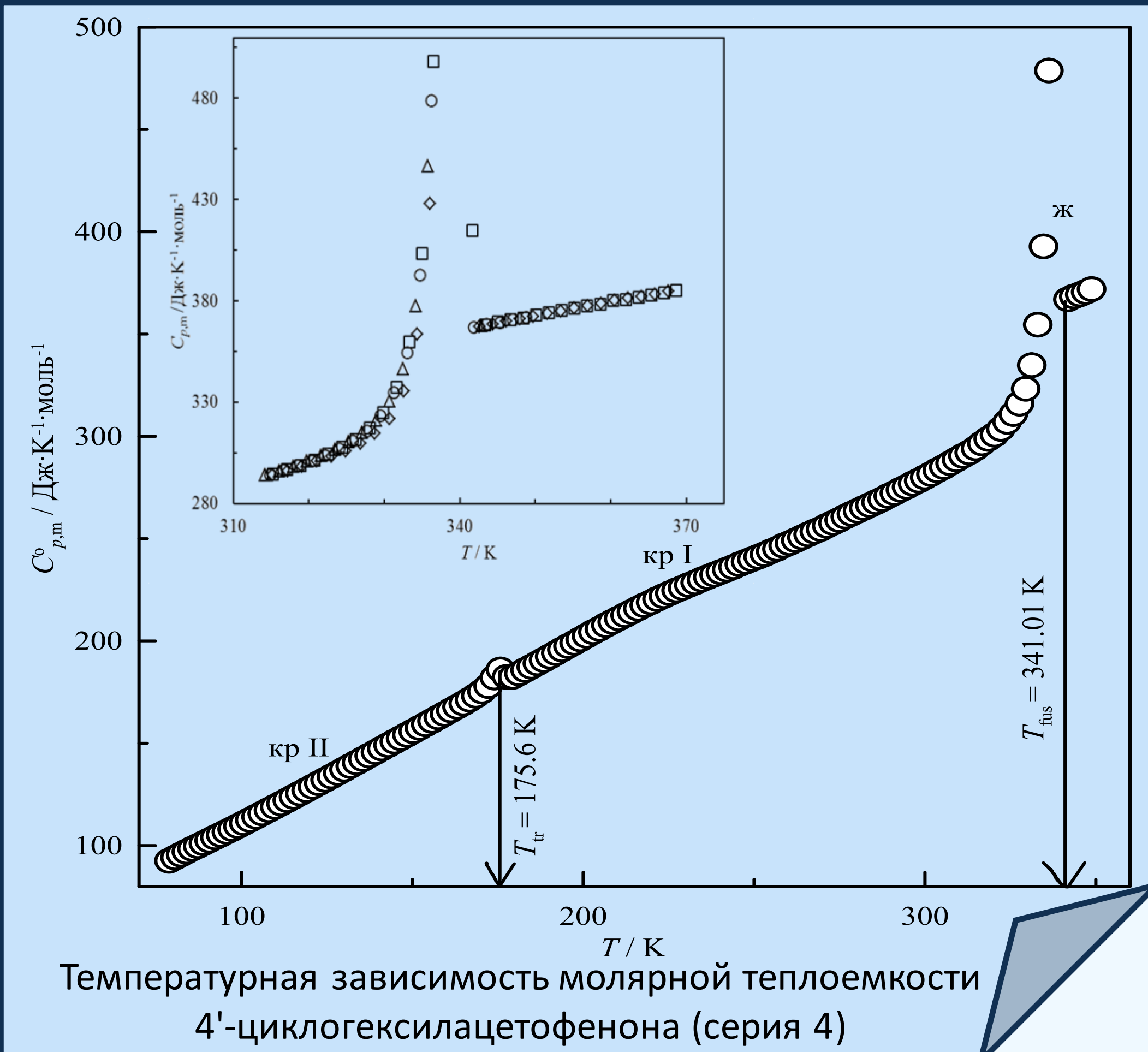
где  
 $C_{p,m}(кр I) / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1} = 174,9 - 0,1829(T / \text{К}) + 1,779 \cdot 10^{-3} (T / \text{К})^2$ ,  
 $C_{p,m}(ж) / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1} = -60,90 + 1,779(T / \text{К}) - 1,543 \cdot 10^{-3}(T / \text{К})^2$ .

Молярная энтальпия твердофазного перехода кр II – кр I рассчитана по уравнению:

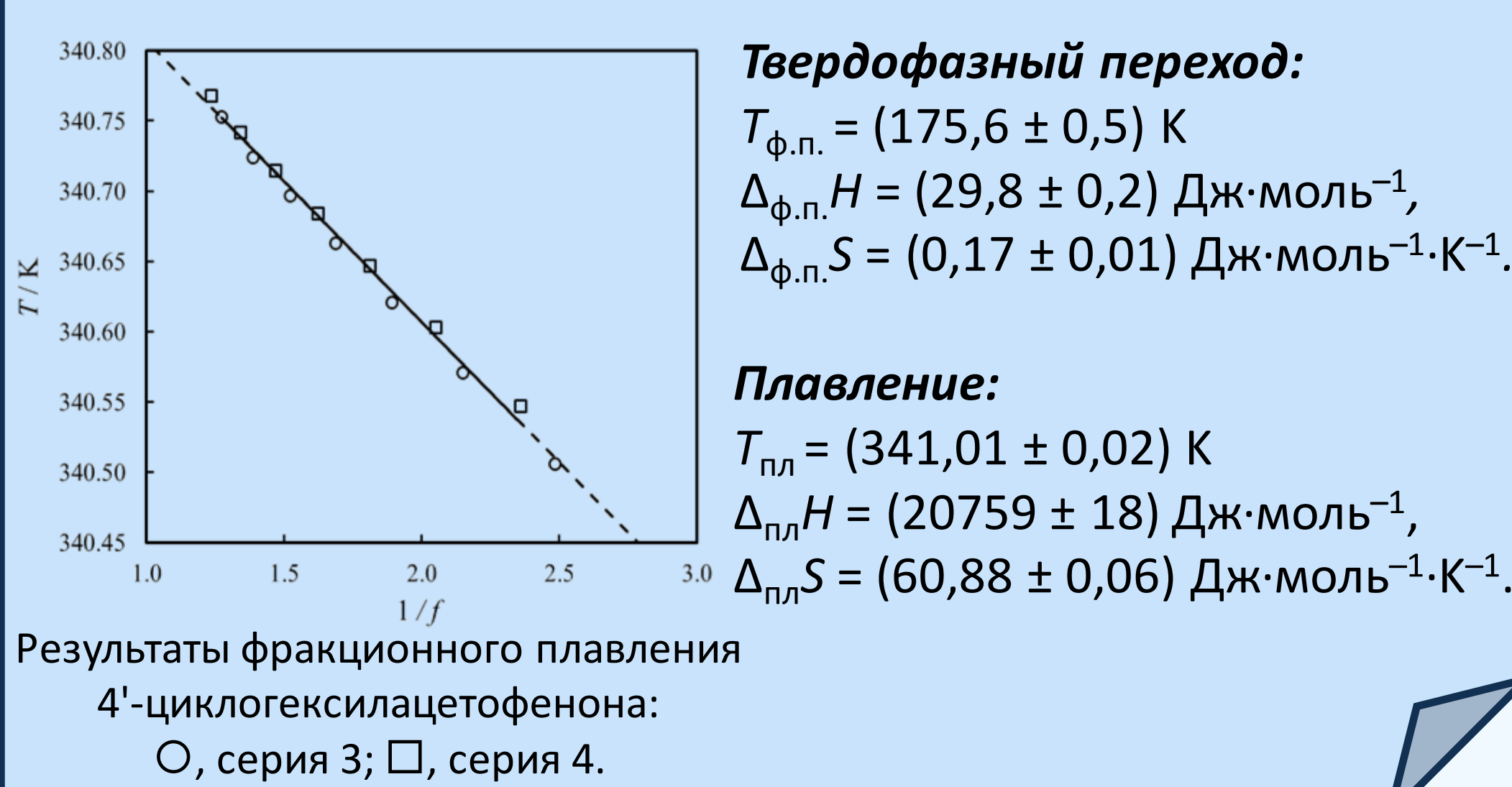
$$\Delta_{ф.п.} H_m^{\circ} = Q - Q_3 = Q - \int_{T_{нач}}^{T_{кон}} C_{p,m}(кр) dT$$

где  $C_{p,m}(кр) / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1} = 104,9 - 1,368(T / \text{К}) + 2,228 \cdot 10^{-2}(T / \text{К})^2 - 9,539 \cdot 10^{-5}(T / \text{К})^3 + 1,514 \cdot 10^{-7}(T / \text{К})^4$

## Теплоемкость



## Параметры фазовых переходов



## Термодинамические функции

$T / \text{К}$	$C_{p,m}^{\circ} / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$	$\frac{\Delta_{80}^T H_m^{\circ}}{T} / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$	$\frac{\Delta_{80}^T S_m^{\circ}}{T} / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$	$-(G_m^{\circ}(T) - H_m^{\circ}(80)) / T / \text{Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$
кристалл II				
80	$93,65 \pm 0,39$	0	0	0
100	$110,4 \pm 0,5$	$20,41 \pm 0,09$	$22,70 \pm 0,10$	$2,293 \pm 0,128$
150	$155,6 \pm 0,7$	$57,86 \pm 0,24$	$75,92 \pm 0,32$	$18,05 \pm 0,40$
175,6	$179,1 \pm 0,8$	$73,83 \pm 0,31$	$102,2 \pm 0,4$	$28,41 \pm 0,53$
кристалл I				
175,6	$179,1 \pm 0,8$	$74,00 \pm 0,37$	$102,4 \pm 0,4$	$28,41 \pm 0,57$
200	$201,5 \pm 0,8$	$88,18 \pm 0,42$	$127,1 \pm 0,5$	$38,95 \pm 0,68$
250	$240,3 \pm 1,0$	$115,0 \pm 0,5$	$176,6 \pm 0,7$	$61,57 \pm 0,91$
298,15	$278,6 \pm 1,2$	$138,2 \pm 0,6$	$222,1 \pm 0,9$	$83,83 \pm 1,12$
300	$280,2 \pm 1,2$	$139,1 \pm 0,6$	$223,8 \pm 0,9$	$84,69 \pm 1,12$
341,01	$319,5 \pm 1,3$	$158,4 \pm 0,7$	$262,1 \pm 1,1$	$103,7 \pm 1,3$
жидкость				
341,01	$366,3 \pm 1,5$	$219,2 \pm 0,9$	$323,0 \pm 1,4$	$103,7 \pm 1,6$
350	$372,8 \pm 1,6$	$223,1 \pm 1,0$	$332,6 \pm 1,4$	$109,5 \pm 1,7$
360	$379,6 \pm 1,6$	$227,4 \pm 1,0$	$343,2 \pm 1,4$	$115,8 \pm 1,7$
370	$386,1 \pm 1,6$	$231,6 \pm 1,0$	$353,7 \pm 1,5$	$122,1 \pm 1,8$