

АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ. ФІЗИЧНА ТА КОЛОЇДНА ХІМІЯ. НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ. ОРГАНІЧНА ХІМІЯ

І. Б. Собечко¹, Ю. І. Горак², В. М. Дібрівний¹, Л. В. Гошко¹

¹ Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра фізичної, аналітичної та загальної хімії,
кафедра вищої математики,

² Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра органічної хімії
phys.chem.lp@gmail.com

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ 5-(2-НІТРОФЕНІЛ)ФУРАН-2-КАРБАЛЬДЕГІДУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ У КОНДЕНСОВАНОМУ СТАНІ

<https://doi.org/10.23939/ctas2020.02.001>

З використанням прецизійного бомбового калориметра спалювання В-08-МА експериментально визначено енергії згорання 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегіду, 5-(2-нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду та 5-(2-нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду. На основі отриманих даних розраховані величини ентальпій згорання та утворення речовин у конденсованому стані. Наведено порівняльний аналіз експериментально визначених величин з теоретично розрахованими величинами за адитивними методами розрахунку.

Ключові слова: 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегід, 5-(2-нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегід, 5-(2-нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегід, енергія згорання, ентальпія згорання, ентальпія утворення.

Вступ

5-(4-нітрофеніл)фуран-2-карбальдегід та його метильні й оксиметильні похідні належать до гетероциклічних сполук арилфуранового ряду. Сполуки арилфуранового ряду набули широкого застосування як модифікуючі агенти під час синтезу полімерних матеріалів [1-2], катализаторів [3-4] при переробці целюлози [5], так і синтезу біологічно активних сполук, бо проявляють широкий спектр біологічної активності [6] та є менш токсичними ніж речовини, які містять лише функціоналізований фрагмент фурану [7]. Сполуки з арилфурановим фрагментом почали застосовувати як компоненти фармацевтичних препаратів у лікуванні: нейродегенеративних захворювань [8], генетичних захворювань [9], тютюнової залежності з метою зменшення потреби в нікотині та усуненні симптомів абстиненції у курців, які вирішили не курити [10], ВІЛ-1 інфекції як компонент антиретровірусної терапії [11]. Треба зауважити, що полімерні

матеріали, які містять арилфуранові фрагменти, також проявляють біологічну активність [12]. Незважаючи на достатньо широкий спектр застосування цього класу речовин, їхні термодинамічні властивості у конденсованому стані практично не досліджені.

Величини ентальпій згорання речовини ($\Delta_c H_{298}^0$) належать до основних термохімічних характеристик, оскільки містять інформацію про енергію внутрішніх та міжмолекулярних взаємодій. Розраховані на їхній основі значення ентальпій утворення ($\Delta_f H_{298}^0$) у конденсованому стані слугують ключовими величинами при проведенні термодинамічних розрахунків хімічних процесів, котрі відбуваються за участі індивідуальних речовин.

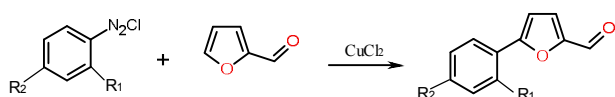
Це дослідження є продовженням термодинамічних досліджень біологічно активних арилфуранових похідних, результати яких опубліковані у [13–15]

Мета роботи

Методом бомбової калориметрії визначили енергії згорання 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегіду, 5-(2-нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду і 5-(2-нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду та порахувати їх ентальпії згорання та утворення у конденсованому стані.

Матеріали та методи досліджень

Синтез 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегіду (I), 5-(2-нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду (II) і 5-(2-нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду (III) здійснювали за схемою наведеною на рис. 1:



де: (I) $R_1 = -NO_2$, $R_2 = -H$; (II) $R_1 = -NO_2$, $R_2 = -CH_3$; (III) $R_1 = -NO_2$, $R_2 = -OCH_3$.

Рис. 1. Схема реакції синтезу 5-арил-2-фуранкарбальдегідів

У колбу вносили 19 г (0,2 моля) фурфуролу, 2 г купрум (II) хлориду і 80 мл диметилкетону. До одержаного розчину при інтенсивному перемішуванні поступово додавали розчин арендіазоній хлориду, одержаний діазотуванням 0,21 моля відповідного аміну. Після закінчення виділення азоту продукт відфільтровували та перекристалізували з етанолу. Для експериментального визначення енергій згорання використовували зразки альдегідів, отримані після різної кратності перекристалізації, а саме зразки № 1, 2 і 3 відібрані після три-, чотири- та п'ятикратної перекристалізації відповідно.

Ідентифікацію зразків проводили за результатами ЯМР спектроскопії. Спектри ЯМР 1H записували на приладі Varian 600 (600 МГц) з використанням розчинників ДМСО- d_6 та ацетону. Хімічні зміщення (δ , м.ч.) наведені відносно сигналу ДМСО чи ацетону (2,50 м.ч.).

(I) 1H NMR (600 MHz, DMSO) δ 7.24 (d, $J = 3.7$ Hz, 1H, fur), 7.72 (d, $J = 3.7$ Hz, 1H, fur), 7.79 (t, $J = 7.8$, 1H, C_6H_4), 7.88 (t, $J = 7.8$ Hz, 1H, C_6H_4), 7.99 (d, $J = 7.8$, 1H, C_6H_4), 8.07 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H, C_6H_4), 9.66 (s, 1H, CHO).

(II) 1H NMR (600 MHz, Acetone) δ 2.53 (s, 3H, CH_3), 6.98 (d, $J = 3.7$ Hz, 1H, fur), 7.54 (d,

$J = 3.7$ Hz, 1H, fur), 7.65 (d, $J = 7.8$ Hz, 1H, C_6H_3), 7.79 (s, 1H, C_6H_3), 7.82 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H, C_6H_3), 9.65 (s, 1H, CHO).

(III) 1H NMR (600 MHz, Acetone) δ 3.95 (s, 3H, CH_3), 6.91 (d, $J = 3.7$ Hz, 1H, fur), 7.38 (d, $J = 3.5$ Hz, 1H, fur), 7.51 – 7.53 (m, 2H), 7.84 (d, $J = 8.7$ Hz, 1H, C_6H_3), 9.66 (s, 1H, CHO).

Енергію згорання речовин визначали на прецизійному калориметрі спалювання В-08-МА з ізотермічною оболонкою ($\pm 0,003$ K) та статичною калориметричною бомбою. Енергетичний еквівалент калориметричної системи ($W = 15277 \pm 8$ Дж/В) визначали з точністю $\pm 0,06$ %, спалюючи еталонну бензойну кислоту марки К-1, вміст основного компонента якої сягав $99,995 \pm 0,01$ мол %. Теплота згорання бензойної кислоти ($\Delta_c U$) з урахуванням фактора Джессупа становила $-26434,4$ Дж/г.

Оскільки за нормальних умов досліджувані речовини перебували у твердому агрегатному стані, то перед проведенням досліду їх перетирали у халцедоновій ступці та таблетували у пресформі з нержавіючої сталі за допомогою ручного пресу. Додатково, перед спалюванням, запресовані таблетки герметизували в ампулах з териленової плівки завтовшки 0,02 мм, бо альдегіди за умов надлишку кисню здатні окиснюватися упродовж підготовчого періоду, що негативно впливатиме на достовірність та ідентичність отриманих результатів. Терилен також слугує допоміжним матеріалом, оскільки займання зразка відбувалось одночасно по всій поверхні, що спонукає до підвищення температури в зоні горіння та збільшення повноти згорання взірця. Териленову ампулу обв'язували бавовняною ниткою і розташовували у платиновій чашці. Запалювання зразка під час досліду ініціювали розрядом конденсаторів через платинову дrottину, яка підпалювала бавовняну нитку. Початковий тиск попередньо очищеного від горючих домішок, вуглекислого газу та води кисню, становив 32 кПа, а початкова температура головного періоду у всіх експериментах – 298 К.

Масу речовини, що згоріла під час досліду, визначали за кількістю CO_2 в газоподібних продуктах згорання [3] з точністю $\pm 1 \cdot 10^{-4}$ г. Вміст монооксиду вуглецю контролювали в окремих дослідах за допомогою індикаторних трубок з точністю $\pm 5 \cdot 10^{-6}$ г. Надійність газового аналізу

підтверджена серією експериментів зі спалювання стандартної бензойної кислоти при визначенні енергетичного еквіваленту калориметричної системи. Кількість сажі, котра утворилася на стінках платинової чашки, визначали зважуванням платинової чашки з точністю $\pm 5 \cdot 10^{-6}$ г.

Вміст HNO_3 , що утворився в результаті досліді, визначали титруванням 0,1н розчином КОН.

Результати досліджень та їх обговорення

Зміну внутрішньої енергії в умовах бомби ΔU_B (Дж/моль) при згоранні досліджуваних альдегідів розраховували за рівнянням 1:

$$\Delta U_B = \frac{W \cdot \Delta T - q_{fuser} - q_{ter} - q_{\text{HNO}_3} + q_{carb}}{m_{comp}} \cdot M \quad (1)$$

де: W – енергетичний еквівалент калориметричної системи; m_{comp} – маса речовини, яка

згоріла за час досліді; M – молекулярна маса речовини; q_{fuser} , q_{ter} , q_{HNO_3} , q_{carb} – кількість енергії, яка виділялась при згоранні бавовняної нитки (16704,2 Дж/г), терилової ампули (22944,2 Дж/г), утворенні розчину нітратної кислоти (59 Дж/г) та утвореної сажі (32800 Дж/г), відповідно. ΔT – істинне зростання температури у калориметричному досліді.

У табл. 1 наведено результати розрахунку калориметричного визначення внутрішньої енергії згорання досліджуваних речовин та їхню повноту згорання. Повноту згорання розраховували як співвідношення маси діоксиду вуглецю, визначеного за результатами газового аналізу ($m_{\text{CO}_2}^{exp}$), до маси діоксиду вуглецю, розрахованого за початковою наважкою речовини, яку брали для дослідження ($m_{\text{CO}_2}^{calc}$).

Таблиця 1

Результати експериментального визначення енергій згорання похідних 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегіда та його похідних

Зразок	m_{comp} , г	ΔT , В	q_{fuser} , Дж	q_{HNO_3} , Дж	q_{carb} , Дж	q_{ter} , Дж	$-\Delta U$, Дж/г	$m_{\text{CO}_2}^{exp} / m_{\text{CO}_2}^{calc}$
5-(2-Нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегід (I)								
1	0,32424	0,55916	100,4	8,3	17,5	795,4	23611	0,9964
	0,30861	0,53675	87,8	9,4	23,3	834,7	23627	0,9996
	0,35576	0,60653	94,1	10,6	40,8	800,0	23617	0,9990
2	0,27531	0,48260	110,4	11,8	67,2	802,6	23665	0,9994
3	0,30758	0,5367	108,1	11,8	21,5	834,0	23626	0,9991
	0,35126	0,59695	112,3	11,8	4,9	698,5	23635	0,9965
$\Delta U_{сер} = -23630 \pm 17$ Дж/г								
5-(2-Нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегід (II)								
1	0,23113	0,42072	76,1	7,7	33,3	608,3	24957	0,9988
	0,30721	0,55173	116,0	8,6	48,1	703,5	24898	0,9982
2	0,18512	0,34716	94,2	4,1	21,3	613,9	24917	0,9954
	0,26750	0,44027	82,6	5,0	22,0	–	24899	0,9971
	0,15830	0,30818	88,0	4,1	49,6	565,5	24901	0,9987
3	0,22309	0,43283	132,3	11,8	26,9	941,4	24895	0,9961
	0,30006	0,55599	111,5	18,3	29,2	914,3	24925	0,9946
$\Delta U_{сер} = -24913 \pm 20$ Дж/г								
5-(2-Нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегід (III)								
1	0,11276	0,17045	68,7	3,5	58,1	–	22967	0,9978
	0,22607	0,37341	80,0	7,1	29,4	448,7	22993	0,9939
	0,25685	0,42353	75,9	6,5	45,1	529,7	22983	0,9998
2	0,18231	0,31306	87,9	4,1	34,8	540,8	22953	0,9987
	0,18812	0,31644	73,8	4,1	26,9	456,9	22998	0,9941
3	0,19352	0,34284	87,9	5,9	27,2	724,8	22975	0,9974
	0,22581	0,38978	93,0	8,3	41,2	709,2	22963	0,9978
$\Delta U_{сер} = -22976 \pm 14$ Дж/г								

Зміну енергії реакції згорання альдегідів за стандартних умов ($\Delta_c U^0$) розраховували за рівнянням (2):

$$\Delta_c U^0 = \Delta U_B + \pi \quad (2)$$

де: ΔU_B – середнє значення зміни внутрішньої енергії при згоранні альдегідів в умовах калориметричного досліду, кДж/моль; π – поправка Уошборна.

Поправка Уошборна приводить величину ΔU_B до стандартних умов, так як, значення ΔU_B отримане, як результат експерименту та належить до ізотермічної реакції згорання досліджуваної речовини за умов, які є в бомбі. Дану поправку, за рекомендаціями наведеними у [16] розраховували за так званим спрощеним рівнянням Уошборна, рівняння 3:

$$\pi = \frac{4,184 \cdot P \cdot 0,3}{\Delta U_B / a} \cdot \left[-1 + 1,1 \cdot \left(\frac{b-2c}{4a} \right) - \frac{2}{P} \right] \quad (3)$$

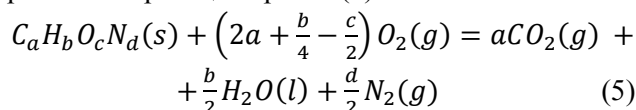
де: P – початковий тиск кисню у бомбі; a, b, c – індекси у формулі $C_a H_b O_c$

Розраховане за рівнянням 3 значення поправки виражене у відсотках від розрахованої величини ΔU_B .

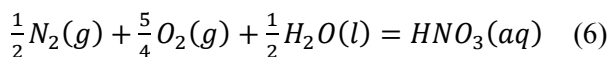
Стандартну ентальпію згорання речовин розраховували з врахуванням поправки на роботу розширення, рівняння 4:

$$\Delta_c H_{298}^0 = \Delta_c U^0 + \Delta n RT, \quad (4)$$

де: Δn – зміна кількості молів газоподібних речовин, розрахована за стехіометричним рівнянням реакції горіння (5):



Утворений як продукт горіння нітрогенвісних сполук, газоподібний азот у присутності води та кисню за рівнянням (6) утворює водний розчин азотної кислоти, кількість якої визначали титруванням розчином гідроксидом калію.



Стандартну ентальпію утворення досліджуваних сполук у конденсованому стані розраховували за рівнянням (7):

$$\Delta_f H_{298}^0 = a \Delta_f H_{298}^0 (CO_2, g) + \frac{b}{2} \Delta_f H_{298}^0 (H_2O, l) + \frac{d}{2} \Delta_f H_{298}^0 (N_2, g) - \Delta_c H_{298}^0 (C_a H_b O_c N_d, s) \quad (7)$$

із використанням рекомендованих величин $\Delta_f H_{298}^0 (CO_2, g) = -393,512 \pm 0,045$ кДж/моль [16], $\Delta_f H_{298}^0 (H_2O, l) = -285,830 \pm 0,040$ кДж/моль [16].

Результати розрахунків стандартних енергій $\Delta_c U^0$, ентальпій $\Delta_c H^0$ згорання та утворення $\Delta_f H_{298}^0$ досліджених сполук у конденсованому стані а також поправки Уошборна та поправки на роботу розширення наведені у табл. 2.

Попередньо описана процедура експериментального визначення та розрахунку ентальпій утворення у конденсованому стані спонукає до значних затрат. Тому постає необхідність у пошуку альтернативних методів визначення $\Delta_f H_{298}^0$ у конденсованому стані. До таких методів належать теоретичні методи розрахунку, основним завданням яких є розрахунок значень, максимально наближених до експериментально визначених. Так, Кохен [17], Домальський [18] та Салмен [19] розробили теоретичні методи розрахунку, які належать до так званих адитивних методів, прототипом яких є метод групової адитивності Бенсона, розроблений для розрахунку ентальпій утворення у газоподібному стані. У цих методах молекула розглядається як сума адитивних внесків, котрі характеризують сукупність груп з яких можна утворити молекулу. Група у молекулі позначається, як багатовалентний атом разом з його лігандами, тобто атомами, з котрими він безпосередньо зв'язаний хімічними зв'язками. Зазвичай, за валентною номенклатурою, спочатку вказується багатовалентний (центральний) атом, а потім у дужках – його оточення (ліганди). У таблиці 4 наведено групові внески та їх величини для розрахунку $\Delta_f H_{298}^0$ у конденсованому (твердому) стані за методами Кохен, Домальського та Салмен.

У табл. 5 наведено результати теоретичних розрахунків величин $\Delta_f H_{298}^0$ у твердому стані, експериментальні значення та абсолютне відхилення розрахункового значення від експериментального.

Судячи з отриманих результатів розрахунку $\Delta_f H_{298}^0$ у твердому агрегатному стані за адитивними методами, найменше відхилення між експериментально визначеними величинами та порашованими спостерігається за методом Домальського та Кохена (окрім сполуки III). Розрахункові величини за адитивною схемою Салман найбільше відрізняються від експериментально визначених величин. Вартує зауважити, що жодний із розглянутих адитивних методів не враховує поправки на міжмолекулярні та міжатомні взаємодії, які присутні у складних речовинах, до яких належать досліджувані.

Таблиця 2

**Енергії та ентальпії згорання та утворення досліджених сполук
у конденсованому стані (кДж/моль)**

Речовина	$U_{C(298)}$	π	ΔnRT	$\Delta_c H^0_{298}$	$\Delta_f H^0_{298}$
I	$-5136,5 \pm 3,8$	-4,5	1,9	$-5134,7 \pm 3,8$	$-194,4 \pm 3,8$
II	$-5765,2 \pm 4,7$	-5,0	0,6	$-5764,6 \pm 4,7$	$-243,8 \pm 4,7$
III	$-5685,0 \pm 3,5$	-5,2	1,9	$-5683,2 \pm 3,5$	$-325,2 \pm 3,5$

Таблиця 3

Групові внески для розрахунку ентальпій утворення у твердому стані, кДж/моль

Група	$\Delta_f H^0_{298}$			Група	$\Delta_f H^0_{298}$		
	[17]	[18]	[19]		[17]	[18]	[19]
C – (C _b)(H) ₃	-42,3	-46,7	-108,7	Cb – (Cb)2(C)	12,1	13,9	77,3
C – (O)(H) ₃	-42,3	-46,7	-41,4	Cb – (Cb)2(H)	6,3	6,53	3,1
C _d – (C _d) ₂ (H)	11,3	17,5	31,7	Cb – (Cb)2(O)	-4,2	1	-67,9
C _d – (C _d)(H)(O)	0	25,5	-22,1	Cb – (Cb)2(Cd)	24,3	20,3	60,2
CO – (C _d)(H)	-146,9	-120,0	-42,5	Cb – (Cb)2(NO ₂)	-26,5	-32,5	-27,6
Фурановий цикл	-25,1	10,7	-33,4	O – (Cd)2	-138,1	-157,3	-33,4
Cd – (Cb)(O)(Cd)	40	27,9	46,6	O – (Cb)(C)	-134,7	-122,9	-51
Cd – (Cd)(O)(CO)	33,5	7,82	-104,4				

Таблиця 4

Результати розрахунку $\Delta_f H^0_{298}$ з використанням адитивних схем, кДж/моль

Речовина	$\Delta_f H^0_{298}$, (exp)	Кохен [17]		Домальський [18]		Салмен [19]	
		$\Delta_f H^0_{298}$	Δ	$\Delta_f H^0_{298}$	Δ	$\Delta_f H^0_{298}$	Δ
I	-194,4	-191,0	-3,4	-181,9	-12,5	-58,7	-135,7
II	-243,8	-227,5	-16,3	-221,2	-22,6	-93,2	-150,6
III	-325,2	-412,0	86,8	-364,8	39,6	-117,7	-207,5

Висновки

На основі експериментально визначених енергій згорання 5-(2-нітрофеніл)-фуран-2-карбальдегіду, 5-(2-нітро-4-метилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду і 5-(2-нітро-4-оксиметилфеніл)-фуран-2-карбальдегіду пороховано величини ентальпій згорання та утворення у твердому агрегатному стані, які поповняють базу даних термодинамічних величин та можуть бути використані при термодинамічних розрахунках хімічних процесів, котрі відбуватимуться за участі досліджуваних речовин.

References

- Gandini A., Belgacem M. (1997). Furans in polymer chemistry. *Progress in Polymer Science*, 22 (6), 1203–1379.
- Karateev A., Koryagin A., Litvinov D. et al. (2008). New network polymers based on furfuryl glycidil ether. *Chemistry & Chemical Technology*, (1), 19–23.

- Neuhaus W. C., Jemison A., Kozlowski M. (2019) Vanadium-catalyzed selective oxidative homocoupling of alkenyl phenols to synthesize lignan analogs. *ACS Catalysis*, (10), 1–7. doi: 10.1021/acscatal.9b02608.
- Yunzhu Wang, Shinya Furukawa, Xinp Fu, and Ning Yan. (2019). Organonitrogen chemicals from oxygencontaining feedstock over heterogeneous catalysts. *ACS Catalysis*, (10), 1–97. doi: 10.1021/acscatal.9b03744.
- Khallouk K., Solhy A., Kherbeche A., et al. (2020). Effective catalytic delignification and fractionation of lignocellulosic biomass in water over Zn₃V₂O₈ mixed oxide. *ACS Omega* 5 (1), 304–316. doi: 10.1021/acsomega.9b02159
- Holla B. S., Akberali P. M., Shivananda M. K. (2000) Studies on arylfuran derivatives: part X. Synthesis and antibacterial properties of arylfuryl-delta-2-pyrazolines. *Farmaco*. 55 (4) 256–263.
- Subrahmanya K. B., Shivarama B. H. (2003) Facile synthesis of 5-aryl-furan-2-aldehyde and 5-aryl-furan-2- carboxylic acid using ceric ammonium nitrate. *Heterocyclic Communications*. 6 (6), 625–628. doi:10.1515/hc.2003.9.6.625

8. Darren R. Williams, Myung-Ryul Lee, Young-Ah Song, et al. (2007) Synthetic small molecules that induce neurogenesis in skeletal muscle. *J. Am. Chem. Soc.* 129 (30) 9258–9259.
9. Moya-Garzón M. D., Higuera M, Peñalver C., et al. (2018) Salicylic acid derivatives inhibit oxalate production in mouse hepatocytes with primary hyperoxaluria type 1. *J. Med. Chem.* 61, 7144–7167. doi:10.1021/acs.jmedchem.8b00399
10. Denton, T. T., Srivastava, P., Xia, Z., et al. (2018). Identification of the 4-position of 3-alkynyl and 3-heteroaromatic substituted pyridine methanamines as a key modification site eliciting increased potency and enhanced selectivity for cytochrome p-450 2a6 inhibition. *J. Med. Chem.* 61, 7065–7086. doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b00084.
11. Joseph L. Duffy, Brian A. Kirk, Nancy J. Kevin et al (2003). HIV-1 Protease inhibitors with picomolar potency against pi-resistant hiv-1 by modification of the p1 0 substituent. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 13, 3323–3326. doi:10.1016/S0960-894X(03)00680-2.
12. Meng Chen, Qingsong Yu, Hongmin Sun (2013) Novel strategies for the prevention and treatment of biofilm related infections. *Int. J. Mol. Sci* 14 (9), 18488–18501. doi:10.3390/ijms 140918488.
13. Kos R., Sobechko I., Horak Y., Sergeev V., Dibrivnyi V. (2017) Thermodynamic characteristics of ethyl-2-cyano-3-(furan-2-yl)-prop-2-enoate derivatives. *Modern Organic Chemistry Research.* 2 (2), 74–80. doi:10.22606/mocr.2017.22006
14. Dibrivnyi V., Sobechko I., Puniak M., et al. (2015) Thermodynamic properties of 5(nitrophenyl) furan-2-carbaldehyde isomers. *Chemistry Central Journal.* 9:67. 1-8. doi: 10.1186/s13065-015-0144-x.
15. Dibrivnyi V., Marshalek A., Sobechko I., et al. (2019) Thermodynamic properties of some isomeric 5(nitrophenyl)furyl2 derivatives. *BMC Chemistry.* 105. 1–11. doi: 10.1186/s13065-019-0619-2
16. CODATA Recommended key values for thermodynamics. *J. Chem. Thermodynamics.* (1978) 10, 903.
17. Cohen N. (1996). Revised group additivity values for enthalpies of formation (at 298 k) of carbon–hydrogen and carbon–hydrogen–oxygen compounds. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 25 (6), 1411-1481. doi: 10.1063/1.555988.
18. Domalski E. S., Hearinga E. D. (1993). Estimation of the thermodynamic properties of C-H-N-O-S-Halogen compounds at 298.15 K. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 22 (4), 805-1159.
19. Salmon A., Dalmazzone D. (2007) Prediction of enthalpy of formation in the solid state (at 298.15 K) using second-order group contributions. Part 2: Carbon-hydrogen, carbon-hydrogen- oxygen, and carbon-hydrogen-nitrogen-oxygen compounds *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 36 (1), 19-58. doi:10.1063/1.2435401

I. B. Sobechko¹, Yu. I. Gorak², V. M. Dibrivnyi¹, L. V. Goshko¹

¹ Lviv Polytechnic National University,

Department of physical, analytical and general chemistry,

Department of higher mathematics,

² Ivan Franko National University of Lviv,

Department of organic chemistry

phys.chem.lp@gmail.com

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF 5- (2-NITROPHENYL) FURAN-2-CARBALDEHYDE AND ITS DERIVATIVES IN A CONDENSED STATE

Using the precision bomb combustion calorimeter B-08-MA, the combustion energies of 5- (2-nitrophenyl) -furan-2-carbaldehyde, 5- (2-nitro-4-methylphenyl) -furan-2-carbaldehyde and 5- (2-nitro-4-oxymethylphenyl) -furan-2-carbaldehyde. Based on the obtained data, the values of enthalpies of combustion and formation of substances in the condensed state are calculated. A comparative analysis of experimentally determined values with theoretically calculated values by additive calculation methods is given.

Key words: 5- (2-nitrophenyl) -furan-2-carbaldehyde, 5- (2-nitro-4-methylphenyl) -furan-2-carbaldehyde, 5- (2-nitro-4-oxymethylphenyl) -furan-2-carbaldehyde, combustion energy, enthalpy of combustion, enthalpy of formation.