

# АНАЛИЗ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ЖИРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ

*Овчинников В.В.,\* Кулаков А.А., Мальцева С.А.*

*КНИТУ-КАИ, Казань, Россия*

*\*chem\_vvo@mail.ru*

Известно, что жирные кислоты могут быть включены в структуру липидов. Жирные кислоты имеют одну или несколько С=С двойных связей. Такой тип кислот играет важную роль в пищевой и сталелитейной промышленности. По этой причине важно объединить их термохимические данные по теплотам парообразования  $\Delta_{vap}H^\circ$ , сгорания  $\Delta_cH^\circ$ , образования  $\Delta_fH^\circ$  и рассчитать на их основе уравнения, которые могут служить для предсказания свойств новых подобных жирных кислот. Анализ упомянутых выше термодинамических функций жирных кислот: додекановой ( $C_{12}H_{24}O_2$ ), миристиновой ( $C_{14}H_{28}O_2$ ), пальмитиновой ( $C_{16}H_{32}O_2$ ), маргариновой ( $C_{17}H_{34}O_2$ ), стеариновой ( $C_{18}H_{36}O_2$ ) и арахидиновой ( $C_{20}H_{40}O_2$ ), представлен в работах [1, 2] позволил рассчитать уравнения (1-3), в которых функция  $\Delta_{vap}H^\circ$ ,  $\Delta_cH^\circ$  или  $\Delta_fH^\circ$  зависит от числа валентных электронов N без числа электронных пар g атомов кислорода (2 пары) в составе кислот.

$$\Delta_{vap}H^\circ = (27.1 \pm 17.9) + (1.4 \pm 0.2) (N-g); r 0.974 \text{ So } 7.3, (1)$$

$$\Delta_cH^\circ = (5.7 \pm 80.5) - (108.7 \pm 0.8) (N-g); r 0.999, \text{ So } 32.0 (2)$$

$$\Delta_fH^\circ = (-433.5 \pm 50.1) - (4.9 \pm 0.5) (N-g); r 0.977, \text{ So } 20.4 (3)$$

Параметры корреляции расчетных уравнений для жирных кислот, имеющих от 12 до 20 атомов углерода в их структурах, фактически равны тем же параметрам для простых углеродистых кислот [3], но имеют различные ошибки в коэффициентах корреляции.

1. N. Adriaanse, H. Dekker. Heats of combustion of normal saturated fatty acids and their methyl esters. // J. Coops, Rec. Trav. Chim. Pays/Bas, 1965, 84, 393.
2. R.M. Stephenson, S. Malanowski. Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. 1987.
3. Овчинников В.В. Термохимия гетероатомных соединений. Анализ и расчет термодинамических функций органических кислот // Вестник Казанского технол. ун-та, 2014,17, 144.