

УДК 544.3

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗЧИНІВ ЕТИЛ 6-МЕТИЛ-2-ОКСО-4-ФЕНІЛ-1,2,3,4-ТЕТРАГІДРОПІРИМІДИН-5-КАРБОКСИЛАТУ В ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ

О. Рідка^{1*}, В. Матійчук², І. Собечко¹, В. Кочубей¹, В. Сергєєв¹

¹ Національний університет “Львівська політехніка”,
вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна
e-mail: phys.chem.lp@gmail.com;

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

За температурною залежністю розчинності етилового естеру 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти в ізопропанолі, етилацетаті, ацетонітрилі та диметилкетоні розраховано ентальпію та ентропію його розчинення. З урахуванням ентальпії плавлення, визначеної за даними диференційно-термічного аналізу та перерахованої на 298 К, розраховано ентальпії та ентропії змішування за 298 К. Показано вплив розчинника на розчинність та величини ентальпії й ентропії змішування за 298 К.

Ключові слова: ентальпія розчинення, ентальпія змішування, ентальпія плавлення, ентропія розчинення, ентропія змішування, ентропія плавлення, етиловий естер 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти.

DOI: <https://doi.org/10.30970/vch.5902.341>

Інтенсивний розвиток синтезу гетероциклічних сполук обумовлений їх широким використанням у харчовій, сільськогосподарській та фармацевтичній промисловості. Зокрема їх застосування у фармацевтичній промисловості пов'язане з широким спектром біологічної активності [1]. Як відомо [2], у фармацевтичній хімії головною вимогою є застосування особливо чистих речовин на кожному етапі синтезу. Зазвичай, основними методами очистки речовин є сублімація, перегонка та перекристалізація. На практиці для очистки твердих речовин здебільшого використовують перекристалізацію з використанням так званих “класичних” розчинників. Тому дослідження розчинності та термодинамічних параметрів, які супроводжують процес взаємодій розчинника з розчиненою речовиною, є важливим для оптимізації процесів екстракції й очистки органічних сполук.

Мета нашої праці є за експериментально визначеними термодинамічними характеристиками розчинності етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату встановити характер його взаємодій з диметилкетонем, ацетонітрилом, етилацетатом та 2-пропанолом.

Для досліджень розчинності в ацетонітрилі, диметилкетоні, етилацетаті та 2-пропанолі обрано етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилат (рис. 1), який є одним з представників дигідропіримідинів Біджинеллі, для яких характерний широкий спектр біологічної активності. [3]

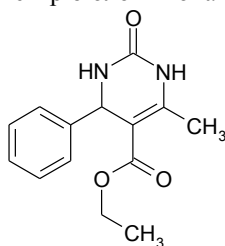


Рис.1. Структурна формула етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату.
Fig.1. The structural formula of ethyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-5-carboxylate

Синтез етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату: у реакційну колбу ємністю 100 мл поміщали 5,3 г (0,05 моля) бензальдегіду, 3,0 г (0,05 моля) сечовини, 9,75 г (0,075 моля) етилового естеру ацетооцтової кислоти, 20 мл етанолу та чотири краплі концентрованої соляної кислоти. Реакційну суміш кип'ятили впродовж 3 год, після чого охолоджували до 273 К та залишали кристалізуватися. Осад, що утворився (9,36 г), фільтрували та двократно перекристалізували з етанолу. Вихід становив 78 % $T_{fus} = 479,9 \pm 1,0$ К.

Ідентифікацію етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату проводили за результатами ЯМР спектроскопії. Спектри ЯМР записували на приладі Varian 400 (400 МГц), розчинник ДМСО- d_6 . Хімічні зміщення (δ , м.ч.) наведено стосовно сигналу ДМСО (2,50 м.ч.). Спектр ЯМР 1H δ : 1,09 (т, J 8,0, 3H, CH_3CH_2), 2,25 (с, 3H, CH_3), 3,97 (к, J 8,0 2H, CH_2), 5,14 (с, 1H, CH), 7,20–7,36 (м, 5H, Ph), 7,74 (с, 1H, NH), 9,19 (с, 1H, NH).

Чистоту речовини, яка становить 100 %, визначали хроматографічно з використанням Agilent 1100 HPLC, обладнаному діодною матрицею та мас-селективним детектором на колоні Zorbax SB-C18, 4,6 mm \times 15 mm, елюент А ацетонітрил-вода з 0,1 % TFA (95:5).

Розчинниками для досліджень розчинності обрано широкоживані органічні розчинники, які відрізняються за полярністю, а саме диметилкетон, ацетонітрил, етилацетат та 2-пропанол. Перед використанням розчинники очищали фракційною перегонкою з наступною їх ідентифікацією за показником заломлення (n_D^{20}) та температурою кипіння (T_{boil}); вміст основного компонента (виражений у % мас.) встановлювали методом газорідної хроматографії (табл.1).

Таблиця 1

Фізико-хімічні властивості розчинників

Table 1

Physical and chemical properties solvent

Розчинники	M г/моль	n_D^{20}		T_{boil} , К		Вміст основного компонента, % мас.
		літ.	визнач.	літ.	визнач.	
Диметилкетон	58,079	1,3591 [4]	1,3592	56,24[4]	55,9	99,9
Ацетонітрил	41,053	1,3442 [4]	1,3444	81,6 [4]	81,4	99,9
Етилацетат	88,106	1,3724 [4]	1,3722	77,1 [4]	76,8	99,9
2-Пропанол	60,096	1,3776 [4]	1,3776	82,2 [4]	81,9	99,9

Насичення розчину етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату проводили в герметичній скляній посудині, оснащений тефлоновою мішалкою, термометром та патрубком для відбору проб у два етапи. На першому етапі речовину витримували в розчиннику за кімнатної температури упродовж двох діб без перемішування. На другому етапі вмикали перемішування (швидкість обертання мішалки – 60–70 об/хв), час якого становив 90 хв за температури досліду. Температуру води в термостаті підтримували з точністю $\pm 0,1$ К. Для підтвердження встановлення рівноваги досліди проводили як в режимі підвищення, так і пониження температури. Відсутність петлі гістерезису на кривій температурної залежності розчинності підтверджує досягнення стану, близького до рівноваги.

Проби розчинів відбирали серіями з 2–3 зразків і переносили в попередньо зважені з точністю $\pm 0,0002$ г бюкси. Після зважування бюкси відкривали, сушили до постійної маси в термошафі за температури 343 К, визначали масу сухого залишку естеру та розраховували його мольну частку в насиченому розчині. У табл. 2 наведені: маса розчиненої речовини (m_2), розчинність речовини, виражена у мольних частках (x_2), та температура (T), за якої проводили розчинення.

Таблиця 2

Температурна залежність розчинності етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату в органічних розчинниках

Table 2

The temperature dependence of the solubility of ethyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylate in organic solvents

T, K	m_2, g	$x_2 \cdot 10^3$	T, K	m_2, g	$x_2 \cdot 10^3$	T, K	m_2, g	$x_2 \cdot 10^3$
1	2	3	4	5	6	7	8	9
<i>Диметилкетон</i>								
281,0	0,0050	0,714	290,5	0,0069	0,985	298,6	0,0073	1,247
281,0	0,0051	0,732	290,5	0,0064	1,031	298,6	0,0073	1,357
281,0	0,0052	0,702	290,5	0,0064	1,013	300,3	0,0078	1,234
282,2	0,0055	0,780	291,5	0,0075	1,080	300,3	0,0096	1,328
282,2	0,0048	0,818	291,5	0,0072	1,074	300,3	0,0074	1,253
283,2	0,0059	0,845	291,5	0,0069	1,071	304,5	0,0130	1,914
283,2	0,0054	0,765	292,4	0,0049	1,020	304,5	0,0137	2,011
283,5	0,0052	0,742	292,4	0,0079	1,107	304,5	0,0137	1,926
283,5	0,0055	0,802	293,5	0,0093	1,336	304,6	0,0114	1,888
283,5	0,0045	0,752	293,5	0,0092	1,307	304,6	0,0110	1,785
284,3	0,0055	0,726	295,5	0,0079	1,533	304,6	0,0122	1,902
284,3	0,0055	0,773	295,5	0,0101	1,583	308,5	0,0121	1,985
287,4	0,0062	0,883	297,0	0,0084	1,223	308,5	0,0102	1,928
287,4	0,0054	0,790	297,0	0,0079	1,128	308,5	0,0106	2,061
287,4	0,0063	0,876	298,5	0,0098	1,433	312,9	0,0141	2,290
289,6	0,0070	0,991	298,5	0,0109	1,542	312,9	0,0118	2,233
289,6	0,0060	0,953	298,5	0,0112	1,599	312,9	0,0112	2,285
289,6	0,0064	0,983	298,6	0,0086	1,266			
<i>Ацетонітрил</i>								
304,0	0,0089	0,692	319,5	0,0160	1,388	331,2	0,0290	2,357
304,0	0,0090	0,709	319,5	0,0137	1,410	332,5	0,0259	2,170
304,0	0,0079	0,649	323,1	0,0202	1,619	332,5	0,0310	2,274
309,0	0,0092	0,755	323,1	0,0187	1,591	332,5	0,0288	2,293
309,0	0,0096	0,879	323,1	0,0206	1,604	336,5	0,0357	2,952
309,0	0,0089	0,833	323,5	0,0188	1,508	336,5	0,0363	2,958
310,2	0,0094	0,844	323,5	0,0194	1,576	336,5	0,0371	2,975

Закінчення табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
314,6	0,0131	1,087	323,5	0,0201	1,531	337,4	0,0339	2,854
314,6	0,0130	1,098	327,8	0,0233	1,871	337,4	0,0355	2,927
314,6	0,0139	1,168	327,8	0,0232	1,880	337,4	0,0358	2,895
314,6	0,0143	1,165	327,8	0,0269	1,908	340,0	0,0363	3,079
314,6	0,0153	1,171	328,0	0,0240	1,931	340,0	0,0397	3,014
318,5	0,0155	1,262	328,0	0,0251	1,980	340,0	0,0377	3,047
318,5	0,0149	1,207	328,0	0,0248	1,953	341,6	0,0418	3,533
318,5	0,0156	1,239	331,2	0,0290	2,382	341,6	0,0436	3,484
319,5	0,0170	1,375	331,2	0,0284	2,354	341,6	0,0447	3,533
<i>Етилацетат</i>								
290,5	0,0049	0,924	303,0	0,0075	1,442	323,0	0,0142	2,727
290,5	0,0037	0,987	308,0	0,0084	1,629	323,0	0,0139	2,76
290,5	0,0054	1,016	308,0	0,0088	1,755	328,0	0,0166	3,32
294,0	0,0060	1,151	308,0	0,0088	1,8	328,0	0,0165	3,303
294,0	0,0063	1,177	313,1	0,0109	2,079	328,0	0,0150	3,35
294,0	0,0066	1,188	313,1	0,0102	2,031	332,0	0,0184	3,731
298,5	0,0055	1,061	313,1	0,0107	2,093	332,0	0,0186	3,758
298,5	0,0062	1,181	317,7	0,0123	2,447	332,0	0,0192	3,79
298,5	0,0058	1,096	317,7	0,0127	2,442	336,0	0,0212	4,279
303,0	0,0069	1,347	317,7	0,0122	2,534	336,0	0,0212	4,223
303,0	0,0072	1,364	323,0	0,0130	2,581	336,0	0,0233	4,255
<i>2-пропанол</i>								
296,0	0,0057	0,892	308,4	0,0088	1,421	328,1	0,0216	3,456
296,0	0,0045	0,711	308,4	0,0092	1,487	328,3	0,0229	3,781
296,0	0,0054	0,844	311,5	0,0095	1,511	328,3	0,0234	3,831
298,0	0,0053	0,849	311,5	0,0098	1,558	328,3	0,0237	3,887
298,0	0,0046	0,889	311,5	0,0112	1,581	332,0	0,0284	4,655
298,0	0,0059	0,948	314,0	0,0122	1,945	332,0	0,0279	4,689
303,0	0,0064	1,099	314,0	0,0114	1,831	332,0	0,0297	4,705
303,0	0,0062	1,075	314,0	0,0115	1,825	333,0	0,0337	5,468
303,0	0,0061	0,966	318,1	0,0130	2,116	333,0	0,0383	5,595
303,0	0,0078	1,243	318,1	0,0151	2,434	333,0	0,0342	5,479
303,0	0,0078	1,241	318,1	0,0143	2,334	342,1	0,0464	7,599
303,0	0,0075	1,182	323,1	0,0147	2,962	342,1	0,0466	7,596
308,0	0,0087	1,39	323,1	0,0106	2,908	342,1	0,0423	7,672
308,0	0,0092	1,359	323,1	0,0127	2,907	347,5	0,0601	10,021
308,0	0,0096	1,456	328,1	0,0219	3,526	347,5	0,0604	9,974
308,4	0,0082	1,32	328,1	0,0220	3,452	347,5	0,0614	9,979

Одержані значення температурної залежності, наведені в табл. 4, апроксимовані лінійним рівнянням: $\ln x_2 = -\Delta_{sol}H/RT + \Delta_{sol}S/R$, де: $\Delta_{sol}H$ – диференційна теплота розчиненої твердої сполуки; $\Delta_{sol}S$ – зміна ентропії при розчиненні досліджуваної твердої сполуки. Тут і далі похибки усіх значень наведені для рівня значимості 0,9.

Термодинамічні параметри розчинності $\Delta_{sol}H$ і $\Delta_{sol}S$ характеризують не тільки процес утворення розчину, а й фазовий перехід кристалічних речовин в рідку фазу розчину. Тому для визначення зміни ентальпії ($\Delta_{mix}H$) й ентропії ($\Delta_{mix}S$), які характеризують взаємодію компонентів у розчині, необхідні величин ентальпії ($\Delta_{fus}H$) й ентропії ($\Delta_{fus}S$) плавлення речовини при 298 К, рівняння (1, 2).

$$\Delta_{sol}H = \Delta_{fus}H + \Delta_{mix}H \quad ; \quad (1)$$

$$\Delta_{sol}S = \Delta_{fus}S + \Delta_{mix}S. \quad (2)$$

Ентальпії плавлення досліджуваних речовин визначали за даними диференційного термічного аналізу, отриманими на дериватографі Q-1500 D системи Paulik–Paulik–Erdey. Взірці аналізували в динамічному режимі зі швидкістю нагрівання 3 К/хв в атмосфері повітря. Для розрахунку теплот плавлення речовин використовували рівняння, яке враховує кількість теплоти, що поглинається зразком під час процесу випаровування, рівняння (3).

$$K \cdot S = Q_{fus} + Q_{vap} = m_o \cdot \Delta H_{fus} + \Delta m_{vap} \cdot \Delta H_{vap} \quad (3)$$

де Q_{fus} и Q_{vap} – кількість теплоти (Дж), яка поглинається при плавленні чи випаровуванні зрізця, відповідно; m_o – маса зрізця (г), яка відповідає температурі початку його плавлення T_{fus} ; Δm_{vap} – втрата маси зрізця (маса пари, г) за період, який враховували для визначення площі піку S (К·с) під кривою ДТА; K – коефіцієнт теплопередачі $K = 0,03668 - 1,13 \cdot 10^{-4}T + 2,721 \cdot 10^{-7}T^2$; $S^2 = 5,96 \cdot 10^{-8}$ [5] (Дж/К·с), $\Delta_{fus}H$ и $\Delta_{vap}H$ – питомі ентальпії плавлення та випаровування речовини (Дж/г).

У табл. 4 наведено результати визначення ентальпій плавлення досліджуваних сполук за температури плавлення, одержані дериватографічним методом. Зміну ентропії за температури плавлення ($\Delta_{fus}S_{T_{fus}}$) розраховували за рівнянням (4).

$$\Delta_{fus}S_{T_{fus}} = \frac{\Delta_{fus}H_{T_{fus}}}{T_{fus}} \quad (4)$$

Розраховані значення $\Delta_{fus}S_{T_{fus}}$ наведено в табл. 3.

Таблиця 3

Ентальпії плавлення зразків
етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату

Table 3

Enthalpy of fusion of ethyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylate

m_o , г	Δm_{vap} , г	S , К·с	q_{vap} , Дж	$\Delta_{fus}H_{T_{fus}}$	$\Delta_{fus}H_{298}$	$\Delta_{fus}S_{T_{fus}}$	$\Delta_{fus}S_{298}$
				кДж/моль		кДж/моль	
$T_{fus} = 479,9 \pm 1,9$ К; $K = 0,04526$ Дж/К·с							
0,1985	0,0022	765,0	0,9317	44,5	32,0	92,7	60,0
0,2040	0,0052	823,5	2,1989	45,1	32,4	94,0	61,0
Середнє значення:				44,8 ± 1,9	32,2 ± 2,0	93,4 ± 2,7	60,5 ± 2,9

Отримані під час експериментальних досліджень величини належать до різних температур, так, величини $\Delta_{sol}H^o$ и $\Delta_{sol}S^o$ розраховані у температурних інтервалах (табл. 2), значення $\Delta_{fus}H^o$ визначені за температури плавлення речовин (табл. 3), тому з метою узагальнення отриманих результатів та можливості розрахунку термодинамічних параметрів ($\Delta_{mix}H^o$; $\Delta_{mix}S^o$) за температури 298 К виникла необхідність у перерахунку $\Delta_{fus}H^o$; $\Delta_{fus}S^o$ до 298 К, для цього застосовували рівняння, наведені у [6]. Результати перерахунку наведено в табл. 3.

Таблиця 4

Термодинамічні параметри розчинності етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату в органічних розчинниках за 298 К

Table 4

Thermodynamic solubility parameters of methyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylate in organic solvents at 298K

№	Розчинник	$x_2 \cdot 10^2$	$\Delta_{sol}H^o$	$\Delta_{mix}H^o$	$\Delta_{sol}S^o$	$\Delta_{mix}S^o$
			кДж/моль		Дж/моль·К	
1	ацетон	0,136 ± 0,010	27,6 ± 1,7	-4,6 ± 2,6	37,8 ± 5,7	-22,7 ± 6,4
2	ацетонітрил	0,048 ± 0,001	37,68 ± 0,11	5,5 ± 2,0	62,97 ± 0,32	2,5 ± 2,9
3	етилацетат	0,123 ± 0,008	26,6 ± 1,0	-5,6 ± 2,2	33,7 ± 3,3	-26,8 ± 4,4
4	2-пропанол	0,083 ± 0,009	41,8 ± 1,2	9,66 ± 2,3	81,4 ± 3,7	20,9 ± 4,7

Величини $\Delta_{mix}H$ та $\Delta_{mix}S$, розраховані за рівняннями 1 та 2 (табл. 4), визначаються різницею енергії міжмолекулярних зв'язків, які розриваються в молекулах вихідних компонентів й утворюються завдяки розчинам. Позитивні значення величин ентальпій змішування в ацетонітрилі та 2-пропанолі свідчать про те, що на руйнування міжмолекулярних зв'язків в індивідуальних речовинах потрібно більше витрат енергії, ніж виділяється внаслідок утворення нових міжмолекулярних зв'язків у досліджених розчинах. Негативні значення ентальпій та ентропій змішування у диметилкетоні та етилацетаті свідчать, що під час досліджуваного процесу виділяється більше енергії, ніж затрачається на руйнування міжмолекулярних зв'язків у початкових речовинах.

Унаслідок проведених досліджень для етил 6-метил-2-оксо-4-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбоксилату визначено термодинамічні властивості розчинності з органічними розчинниками різної полярності. Отримані експериментальні та розрахункові дані можуть бути використані для прогнозування реакційної поведінки речовини у розчині, а також для оптимізації процесів очищення та розділення.

1. *Kovtunenکو V. O.* Drugs with effect on the central nervous system. Kyiv: Perun, 1997. 464 p. (in Ukrainian).
2. *Mashkovsky M. D.* Medicinal products. M.: The New Wave, 2012. 1216 p. (in Russian)
3. *Sandhu S., Sandhu J.* Past, present and future of the Biginelli reaction: a criticalperspective // ARKAT-USA, Inc. 2012. P. 66–130.
4. Chemistry Web-book [Electronic resource]. – Access mode : <http://webbook.nist.gov>.
5. *Sobechko I. B., Van-Chin-Syan Yu. Ya., Kochubei V. V.* et al. The thermodynamic properties of furan-2-carboxylic and 3- (2-furyl) -2-propenoic acids. Journal of Physical Chemistry. 2014. Vol. 88. No. 12. P. 1885–1892 (in Russian).
6. *Sobechko I. B., Prokop R. T., Gorak Yu. I.* et al. Thermodynamic characteristics of 1-methyl-2-pyrrolicarboxylic acid dissolution in organic solvents. Questions of chemistry and chemical technology. 2013. No. 4. P.12–15 (in Russian).

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE SOLUBILITY OF METHYL ESTER OF 6-METHYL-2-OXO-4-ARYL-1,2,3,4-TETRAHYDROPIRIMIDYN-5-CARBOXYLIC ACIDО. Ridka^{1*}, V. Matychuk², I. Sobechko¹, V. Kochubei¹, V. Sergeev¹

¹ National University "Lviv Polytechnic",
Bandera Str., 12, 79013 Lviv, Ukraine
e-mail: phys.chem.lp@gmail.com;

² Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine

Enthalpy and entropy of dissolution from the temperature dependence of the solubility of ethyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylate in isopropanol ($\Delta_{sol}H=41.8\pm 1.2$ kJ/mol; $\Delta_{sol}S=81.4\pm 3.7$ J/mol•K), ethyl acetate ($\Delta_{sol}H=26.6\pm 1.0$ kJ/mol; $\Delta_{sol}S=33.7\pm 3.3$ J/mol•K), acetonitrile ($\Delta_{sol}H=37.68\pm 0.11$ kJ/mol; $\Delta_{sol}S=62.97\pm 0.32$ J/mol•K) and dimethyl keton ($\Delta_{sol}H=27.6\pm 1.7$ kJ/mol; $\Delta_{sol}S=37.8\pm 5.7$ J/mol•K) were determined

Determined values of enthalpy ($\Delta_{sol}H$) and entropy ($\Delta_{sol}S$) of dissolution include values of enthalpy $\Delta_{mix}H^o$ and entropy $\Delta_{mix}S^o$ of mixing and a phase transition of crystalline substances to the liquid phase in solution $\Delta_{fus}H^o$ and $\Delta_{fus}S^o$. Fusion enthalpy of substance in kJ/mol $\Delta_{fus}H_{479.9}=44.8\pm 1.9$ was determined from differential thermal analysis (DTA) data obtained using derivatograph Q-1500 D of Paulik – Paulik – Erdey system and calculated to 298K $\Delta_{fus}H=32.2\pm 2.0$ kJ/mol and $\Delta_{fus}S^o=60.5\pm 2.9$ J/mol•K, respectively.

Enthalpies and entropies of mixing of the investigated compound severally are: in isopropanol ($\Delta_{mix}H^o=9.66\pm 2.3$ kJ/mol; $\Delta_{mix}S^o=20.9\pm 4.7$ J/mol •K); ethyl acetate ($\Delta_{mix}H^o=-5.6\pm 2.2$ kJ/mol; $\Delta_{mix}S^o=-26.8\pm 4.4$ J/mol •K); acetonitrile ($\Delta_{mix}H^o=5.5\pm 2.0$ kJ/mol; $\Delta_{mix}S^o=2.5\pm 2.9$ J/mol •K) and dimethyl keton ($\Delta_{mix}H^o=-4.6\pm 2.6$ kJ/mol; $\Delta_{mix}S^o=-22.7\pm 6.4$ J/mol •K). $\Delta_{mix}H$ and $\Delta_{mix}S$ values are determined by the difference of the energy of destruction of the intermolecular bonds in the molecules of source components and the energy of formation of new bonds in solutions. Positive values of mixing enthalpies for all investigated systems indicate that the destruction of intermolecular bonds in individual substances require more energy than is released during the formation of new intermolecular bonds in the solutions.

As a result of the research, the thermodynamic properties of the solubility of methyl 6-methyl-2-oxo-4-phenyl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-5-carboxylate in organic solvents of different polarity were determined. The experimental and calculated data can be used to predict the reaction behavior of the substance in the solution and to optimize purification and separation processes.

Keywords: enthalpy of dissolution, enthalpy of mixing, enthalpy of fusion, entropy of dissolution, entropy of mixing, entropy of fusion, ethyl 6-methyl-2-oxo-4-aryl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidin-5-carboxylate.

Стаття надійшла до редколегії 31.10.2017

Прийнята до друку 11.04.2018