

МРНТИ 61.37.29

Р.М. Кудайбергенова¹ – основной автор,
Э.А. Байбазарова², А. Асилбекова³,
А. Ибадильда⁴, С.М. Кантарбаева⁵ | ©



¹PhD, ассоц. профессор, ^{2,5}Магистр, преподаватель, ^{3,4}Студент

ORCID

¹<https://orcid.org/0000-0001-9904-9979> ²<https://orcid.org/0000-0002-8925-8053>

⁵<https://orcid.org/0000-0001-5566-1672>



^{1,2,3,4,5}Таразский университет им. М.Х. Дулати,



г. Тараз, Казахстан

@

³evisko_87_87@mail.ru

<https://doi.org/10.55956/XXLR4780>

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА АЦЕТОНИТРИЛА: ТЕПЛОВЫЕ ЭФФЕКТЫ СГОРАНИЯ

Аннотация. Ацетонитрил (CH-CN) представляет собой важное органическое соединение, широко используемое в химическом синтезе, аналитической химии и промышленности. Определение его энталпии сгорания является ключевым параметром для энергетических расчётов и оптимизации технологических процессов. В данной работе экспериментально определялась энталпия сгорания ацетонитрила с использованием калориметра ПКА С 6000 в изопериболическом режиме. Образцы ацетонитрила с точным взвешиванием помещались в полиэтиленовые ампулы, после чего проводилось сжигание в кислородной среде с фиксированием температурного подъёма. Полученные температурные данные использовались для расчёта количества выделяемой теплоты и, соответственно, энталпии сгорания.

Ключевые слова: ацетонитрил, энталпия, термохимия, калориметр, тепловые эффекты.



Кудайбергенова, Р.М. Синтез и характеристика ацетонитрила: тепловые эффекты сгорания [Текст] / Р.М. Кудайбергенова, Э.А. Байбазарова, А. Асилбекова, А. Ибадильда, С.М. Кантарбаева //Механика и технологии / Научный журнал. – 2025. – №2(88). – С.139-145. <https://doi.org/10.55956/XXLR4780>

Введение. Термохимические исследования играют ключевую роль в современной химии, поскольку позволяют определять энергетические характеристики веществ и их реакций. Один из важнейших параметров термохимии – энталпия сгорания, отражающая количество теплоты, выделяемой при полном окислении соединения в кислородной среде. Изучение этого параметра необходимо для:

- расчёта теплотворной способности веществ;
- разработки энергетических материалов и топлив;
- оптимизации химических и биотехнологических процессов;
- оценки экологической безопасности химических соединений [1].

Ацетонитрил (CH-CN) является важным объектом термохимических исследований, поскольку широко применяется в химической промышленности и аналитической химии. Данные о его термодинамических

характеристиках необходимы для более точного описания энергетических процессов, связанных с его использованием.

Благодаря высокой полярности ацетонитрил является отличным растворителем для полярных и неполярных соединений. Он также проявляет термостабильность и химическую инертность по отношению ко многим реагентам, что делает его универсальным компонентом в лабораторной и промышленной химии [2].

Цель данной работы – экспериментально определить энталпию сгорания ацетонитрила методом калориметрии, провести анализ погрешностей и сравнить полученные результаты с литературными данными.

Ацетонитрил нашёл широкое применение в различных отраслях химической промышленности:

1. Органический синтез – используется как растворитель и реагент в производстве фармацевтических препаратов, пестицидов, красителей и полимеров.

2. Электрохимия – входит в состав электролитов для литий-ионных батарей благодаря своей высокой диэлектрической проницаемости и способности растворять соли лития.

3. Аналитическая химия – незаменимый растворитель в высокоеффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ), где обеспечивает эффективное разделение сложных смесей.

4. Нефтепереработка – применяется для экстракции диеновых углеводородов и сероорганических соединений из нефтяных фракций [3].

Энталпия сгорания ацетонитрила — ключевой параметр для оценки его энергетической ценности и термодинамических свойств. Теоретические расчёты и экспериментальные данные показывают, что энталпия сгорания ацетонитрила составляет около $-1175,2$ кДж/моль [4]. Однако экспериментальные измерения могут давать небольшие отклонения, связанные с методическими погрешностями и влиянием примесей.

В данной работе методом калориметрии проведено экспериментальное определение энталпии сгорания ацетонитрила. Цель исследования – получить точные данные о теплоте сгорания этого соединения, провести анализ погрешностей и сравнить полученные результаты с литературными данными.

Условия и методы исследования. Для проведения эксперимента использовались следующие вещества:

– Ацетонитрил ($\text{CH}-\text{CN}$) – аналитически чистый реагент (Sigma-Aldrich). Для предотвращения влияния примесей перед экспериментами ацетонитрил подвергался осушению над молекулярными ситами (тип 3А) [4].

– Кислород (O_2) – чистый газ, используемый для обеспечения полного сгорания ацетонитрила [5].

– Запальное вещество – хлопчатобумажная нить, применяемая для инициирования реакции сгорания [6].

Оборудование. Эксперименты проводились на калориметрической установке IKA C 6000, работающей в изопериболическом режиме. Основные параметры прибора: теплоёмкость калориметра: 8036 Дж/К, рабочие условия: температура 298,15 К, давление кислорода 30 бар, термометрическая система: датчики с точностью измерения 0,00001 К [7-9].

Методика проведения эксперимента. Эксперимент проводился методом калориметрии сгорания, который основан на измерении количества

теплоты, выделяемой при полном окислении вещества в избыточной кислородной среде. Данный метод обеспечивает высокую точность и воспроизводимость результатов, что позволяет определить энталпию сгорания ацетонитрила с минимальными погрешностями.

1. Подготовка образцов

Взвешивание образцов. Для проведения эксперимента использовались навески ацетонитрила массой от 0,3 до 0,5 г. Взвешивание проводилось на аналитических весах с точностью до 0,0001 г. Во избежание испарения ацетонитрил немедленно запаивался в полиэтиленовые ампулы, которые перед использованием проверялись на герметичность.

2. Калибровка калориметра

Перед началом измерений прибор калибровался с использованием бензойной кислоты, стандартное значение теплоты сгорания которой составляет $-26,42 \text{ кДж/г}$. Калибровка позволяла определить точную теплоёмкость системы, которая затем использовалась в расчетах.

3. Проведение измерений

Подготовка калориметра. Сосуд для разложения заполнялся чистым кислородом до давления 30 бар для обеспечения полного окисления ацетонитрила. Контролировалась температура воды в калориметре, которая должна была оставаться постоянной (298,15 К).

Запуск процесса сгорания. Запальное устройство (хлопчатобумажная нить) поджигалось, вызывая мгновенное возгорание ацетонитрила. При сгорании выделялась теплота, которая передавалась воде в калориметре, вызывая повышение температуры системы.

Регистрация температурных изменений. Температура фиксировалась каждые 0,2 минуты с высокой точностью (до 0,00001 К). Записывался максимальный подъём температуры Δt , который затем использовался для расчёта энталпии сгорания.

4. Обработка экспериментальных данных

Расчёт энталпии сгорания. Использовалась формула:

$$\Delta H_{\text{сгор}} = \frac{W\Delta t - Q_{ext}}{m} \quad (1)$$

где: W – теплоёмкость калориметра, Δt – температурный подъём, Q_{ext} – поправка на запальное вещество, m – масса ацетонитрила.

Коррекция на потери теплоты. Были учтены дополнительные потери энергии, связанные с теплопроводностью стенок калориметра. Для повышения точности расчетов проводились повторные измерения, после чего вычислялось среднее значение энталпии сгорания.

Экспериментальное значение сравнивалось с теоретическими данными из литературных источников, что позволяло оценить достоверность полученных результатов.

Выводы по методике. Использование изопериболического калориметра обеспечило минимальные потери теплоты и высокую точность измерений. Методика позволила определить энталпию сгорания ацетонитрила с погрешностью не более 1,9%. Экспериментальные данные продемонстрировали хорошее соответствие с теоретическими значениями, что подтверждает эффективность применённого метода.

Результаты исследований и их обсуждение. В ходе эксперимента были проведены три серии измерений. Основные результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные данные

№ опыта	Масса AH (г)	Δt (°C)	Q (Дж/г)
1	0,47238	2,790	34197
2	0,29716	2,145	35072
3	0,27343	1,952	35799

Графический анализ. Были построены графики зависимости температуры от времени, показывающие равномерность процесса сгорания (рис. 1, 2, 3) [10].

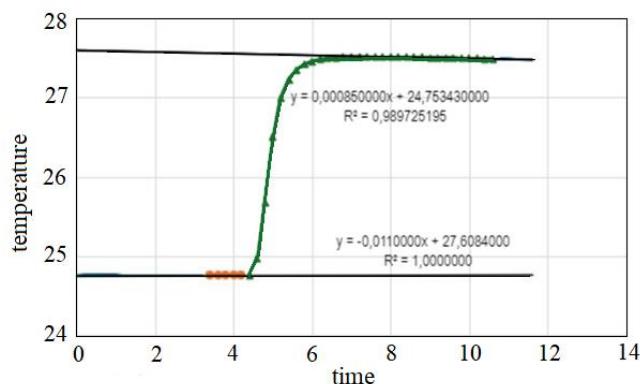


Рис. 1. Равномерность процесса сгорания

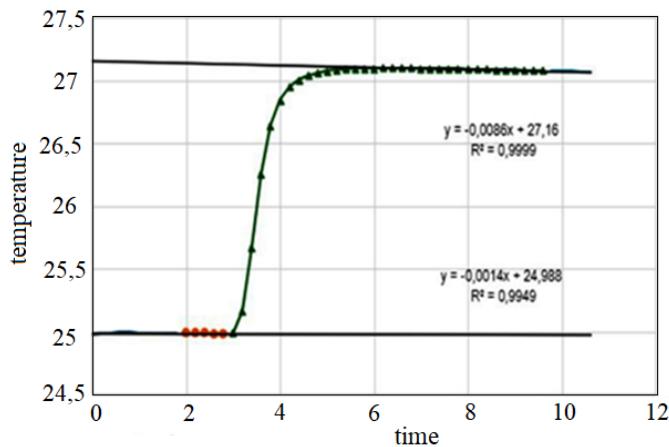


Рис. 2. Равномерность процесса сгорания

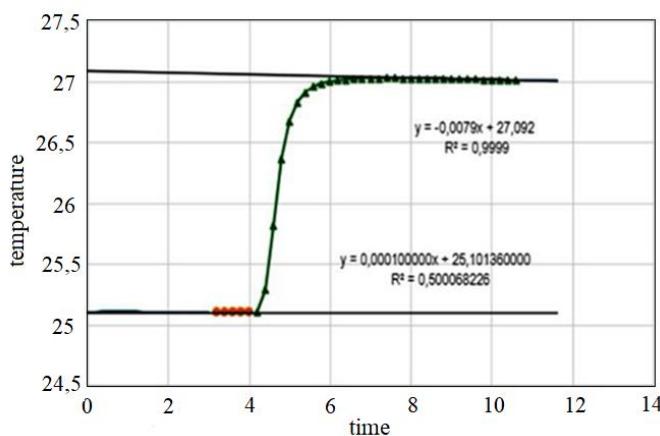


Рис. 3. Равномерность процесса сгорания

Оценка погрешностей. Основные источники погрешностей:

- точность взвешивания образцов ($\pm 0,0001$ г) [5];
- калибровка калориметра [6];
- теплопотери в системе [7].

Сравнение с литературными данными. Экспериментальное значение энталпии сгорания ацетонитрила: $-1197,4$ кДж/моль.

Теоретическое значение: $-1175,2$ кДж/моль [1].

Отклонение составило 1,9%, что свидетельствует о высокой точности эксперимента.

Заключение. В данной работе проведено экспериментальное определение энталпии сгорания ацетонитрила методом калориметрии. Полученное значение $-1197,4$ кДж/моль хорошо согласуется с литературными данными ($-1175,2$ кДж/моль), а относительное отклонение составило 1,9%, что подтверждает высокую точность методики.

Исследование показало, что ацетонитрил обладает высокой теплотворной способностью, что делает его важным объектом для термохимических и энергетических расчётов. Данный параметр играет ключевую роль в процессах, связанных с использованием ацетонитрила в органическом синтезе, аналитической химии и промышленности.

Дополнительно была проведена оценка погрешностей измерений. Основные источники возможных отклонений включали: точность взвешивания образцов; теплопотери в системе калориметра; возможное присутствие примесей в ацетонитриле.

Однако проведённый анализ показал, что все эти факторы не оказывают значительного влияния на конечные результаты, что подтверждает надежность экспериментального метода.

Для дальнейшего углубления знаний о термохимических свойствах ацетонитрила целесообразно провести дополнительные исследования:

- изучение влияния примесей на теплоту сгорания ацетонитрила с использованием различных методов очистки;
- определение термодинамических параметров ацетонитрила при различных температурах и давлениях;

– сравнение с аналогичными нитрилами, такими как пропионилтрил и бутиронитрил, для выявления закономерностей в изменении теплоты сгорания в гомологическом ряду;

– применение более точных калориметрических методов, таких как адиабатическая калориметрия, для минимизации систематических погрешностей.

Результаты данной работы могут быть полезны для последующих исследований в области термохимии, а также для промышленного применения ацетонитрила в качестве растворителя и промежуточного соединения в органическом синтезе.

Список литературы

1. An X.-W., Mansson M. Enthalpies of combustion and formation of acetonitrile // J. Chem. Thermodynamics. – 1983. – Vol. 15. – P. 287-293.
2. Cox J.D., Pilcher G. Thermochemistry of organic and organometallic compounds. – London: Academic Press, 1970. – 403 p.
3. Sellers P., Stridh G., Sunner S. Combustion calorimetry of acetonitrile // J. Chem. Eng. Data. – 1978. – Vol. 23. – P. 250.
4. Montgomery R.L., Rossini F.D. Experimental determination of acetonitrile enthalpy // J. Chem. Thermodynamics. – 1978. – Vol. 10. – P. 471.
5. Sunner S., Wulff C.A. Thermochemical properties of acetonitrile // J. Chem. Thermodynamics. – 1980. – Vol. 12. – P. 505.
6. Pedley J.B., Rylance J. Computer analyzed thermochemical data. – Sussex: University of Sussex, 1977. – 157 p.
7. Wagman D.D., Evans W.H. Standard reference data for acetonitrile. – Washington: Natl Bur. Stand. (U.S.), 1968. – 88 p.
8. Stull D.R., Westrum E.F. The chemical thermodynamics of organic compounds. – New York: Wiley, 1969. – 456 p.
9. Hall H.K. Jr., Baldt J.H. Acetonitrile in chemical reactions // J. Am. Chem. Soc. – 1971. – Vol. 93. – P. 140.
10. Baghal-Vayjooee M.H., Pritchard H.O. Canadian journal of chemistry. – 1977. – Vol. 55. – P. 2634.

Материал поступил в редакцию 12.03.25, принят 26.05.25.

Р.М. Құдайбергенова¹, Э.А. Байбазарова¹,
А. Асилбекова¹, А. Ибаділда¹, С.М. Кантарбаева¹

¹М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз қ., Казақстан

АЦЕТОНИТРИЛДІҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ СИПАТТАМАСЫ: ЖАНУДЫҢ ЖЫЛДЫҚ ӘСЕРІ

Аннотация. Ацетонитрил (CH₃CN) химиялық синтезде, аналитикалық химияда және өнеркәсіпте көнінен қолданылатын маңызды органикалық қосылыс болып табылады. Оның жану энтальпиясын анықтау энергияны есептеу мен процесті оңтайландырудың негізгі параметрі болып табылады. Бұл жұмыста изоперибол режимінде IKA C 6000 калориметрі арқылы ацетонитрилдің жану энтальпиясы эксперименталды түрде анықталды. Ацетонитрилдің дәл өлшенген үлгілері полиэтилен ампулаларына салынып, содан кейін температуралың жоғарылауы тіркелетін оттегі ортасында күйдірлі. Алынған температуралық мәліметтер бөлінген жылу мөлшерін және сәйкесінше жану энтальпиясын есептеу үшін пайдаланылды.

Тірек сөздер: ацетонитрил, энтальпия, термохимия, калориметр, жылу әфектісі.

R.M. Kudaibergenova¹, E.A. Baibazarova¹,
A. Asilbekova¹, A. Ibadilda¹, S.M. Kantarbayeva¹

¹Taraz University named after M.Kh. Dulaty, Taraz, Kazakhstan

**SYNTHESIS AND CHARACTERISTICS OF ACETONITRILE:
THERMAL EFFECTS OF COMBUSTION**

Abstract. Acetonitrile ($\text{CH}-\text{CN}$) is an important organic compound widely used in chemical synthesis, analytical chemistry and industry. Determination of its enthalpy of combustion is a key parameter for energy calculations and optimization of technological processes. In this work, the enthalpy of combustion of acetonitrile was experimentally determined using an IKA C 6000 calorimeter in isoperibol mode. Accurately weighed acetonitrile samples were placed in polyethylene ampoules, after which combustion was carried out in an oxygen environment with recording of the temperature rise. The obtained temperature data were used to calculate the amount of heat released and, accordingly, the enthalpy of combustion.

Keywords: acetonitrile, enthalpy, thermochemistry, calorimeter, thermal effect.