

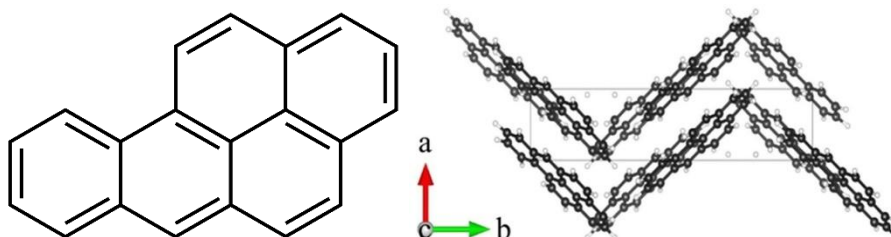
ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БЕНЗ[*a*]ПИРЕНА

Богдашкина А.М., Сологубов С.С., Маркин А.В.

Нижегородский государственный университет
603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) – это органические соединения, состоящие из двух и более конденсированных ароматических колец. Они представляют собой кристаллические вещества с высокими температурами плавления и низким давлением насыщенных паров. ПАУ плохо растворимы в воде, характеризуются высокой устойчивостью к внешним воздействиям и способностью накапливаться в окружающей среде в течение длительного времени. Повышенный научный интерес к полициклическим ароматическим углеводородам связан с тем, что они обладают канцерогенной и мутагенной активностью и представляют опасность для здоровья человека.

Объектом исследования является бенз[*a*]пирен (CAS # 50-32-8) – представитель семейства ПАУ, который относится к первому классу опасности и обладает чрезвычайно высокой токсичностью (см. рисунок). В России бенз[*a*]пирен является индикатором состояния окружающей среды и подлежит обязательному контролю во всех природных объектах (вода, воздух, почва).



Молекулярная и кристаллическая структуры бенз[*a*]пирена $C_{20}H_{12}$

В работе определена теплоемкость бенз[*a*]пирена методами прецизионной адиабатической вакуумной калориметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии в температурном интервале 7–590 К. В области 370–400 К обнаружен полиморфный переход бенз[*a*]пирена из моноклинной в орторомбическую кристаллическую структуру; в интервале 440–470 К выявлен эндотермический эффект, обусловленный плавлением бенз[*a*]пирена. По полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции бенз[*a*]пирена для области от $T \rightarrow 0$ до 590 К. Проведен сравнительный анализ термодинамических свойств бенз[*a*]пирена и других полициклических ароматических углеводородов (нафталина, антрацена, пирена, флуорантена).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2026-0013).