

ЭНЕРГИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИЛ В ЖИДКИХ ГАЛОГЕНАЛКАНАХ И ИХ БИНАРНЫХ СМЕСЯХ

Неручев Ю.А., Коротковский В.И., Рышкова О.С.*

Курский гос. ун-т., Курск, Россия

**уаап2003@mail.ru*

Проведены измерения скорости звука (0,1%), плотности (0,05%) и изобарной теплоемкости (2%) жидких галогеналканов и их бинарных смесей в интервале температур (25–150) °С. Рассчитана энергия межмолекулярных сил в жидких галогеналканах и их бинарных смесях по данным об их теплофизических свойствах.

Показано, что в указанных соединениях помимо дисперсионных сил притяжения ($m = 6$) и сил отталкивания ($n = 12$) проявляют себя дальнедействующие силы связи, вызывающие димерную ассоциацию частиц. Величина энергии межмолекулярных сил определяется соотношением:

$$|E_p| = B\rho^2 + b\rho^{1/3} \left(1 - \left(\frac{\rho}{\rho_b} \right)^{11/3} \right),$$

в котором B – константа дисперсионных сил, b – константа сил связи, определяемые критическими параметрами веществ, ρ – плотность жидкости, а ρ_b – плотность при нормальной температуре кипения. Выражение в скобках учитывает вклад энергии сил отталкивания.

В рамках механизма атом-атомного взаимодействия получена формула для прогнозирования величины константы дисперсионных сил по данным об индивидуальных свойствах атомных центров:

$$B = B_0 \left(\frac{(1 - \chi)\mu_l + \frac{l+1}{n+1}\chi\mu_n}{\mu_l} \right)^3 \left(\xi^2 + (1 - \xi)^2 a + 2\xi(1 - \xi)\sqrt{a} \right).$$

Здесь n – номер n -алкана, l – номер n -алкила, присутствующего в смеси, χ – весовая концентрация n -алкила, ξ – величина, характеризующая концентрацию атомов водорода в смеси.

Работа поддержана грантом РФФИ N 16-08-01203.

1. Korotkovskii V.I. , Ryshkova O.S. , Neruchev Yu.A. , Goncharov A.L., Postnikov E.B. Isobaric Heat Capacity, Isothermal Compressibility and Fluctuational Properties of 1-Bromoalkanes // Int .J. Thermophys. 2016. V. 37:58.
2. Ryshkova O.S. , Bolotnikov M.F., Korotkovskiy V.I. , Neruchev Yu.A. Peculiarities of temperature dependence of liquid 1-chloroalkane viscosity // High Temperatures. 2016. V. 54. P. 872.