

# ВПЛИВ КЛАСТЕРНОЇ БУДОВИ НА ХАРАКТЕРНІ ТЕМПЕРАТУРИ РЕЧОВИНИ

## INFLUENCE OF THE CLUSTER STRUCTURE ON CHARACTERISTIC SUBSTANCE TEMPERATURES

*Доц., к.т.н. Д.Г. Трегубов, нач. каф., к.т.н. О.В. Тарахно, студ. (І рівень) Ф.Д. Трегубова*  
*Національний університет цивільного захисту України*

**Анотація.** Показано наявність коливального характеру зміни характерних температур n-alkanів. Створено емпіричні формули для прогнозу температур плавлення та кипіння з коефіцієнтом кореляції 0,999.

**Ключові слова:** кластер, будова речовини, характерна температура, коливальність, алкани.

**Annotation.** The presence of the oscillatory nature of the change in the characteristic temperatures of n-alkanes is shown. Empirical formulas for forecasting melting and boiling points with a correlation coefficient of 0.999 have been created.

**Keywords:** cluster, structure of matter, characteristic temperature, oscillation, alkanes.

**Вступ.** Властивості речовини пов'язані з утворенням надмолекулярних структур кластерного типу, стан яких залежить від температури у системі. Тому характерні температури, за якими можна охарактеризувати небезпеки зберігання речовин, пов'язані зі змінами у будові таких надмолекулярних утворень. Але для прогнозу означених властивостей фіксований статистичний підхід є складним внаслідок анізотропії міжмолекулярної взаємодії [1].

**Актуальність.** Характерні температури n-alkanів відносяться до найбільш досліджених параметрів речовини [2]. Відзначають їх коливальний характер для молекул з «парною» та «непарною» кількістю атомів карбону [3], а також для масових швидкостей вигорання n-спиртів при пожежі [4]. Тобто є непослідовність значень характерних температур в одному гомологічному ряді, що на даний час у практичних розрахунках не враховується та робить прогноз різних властивостей неадекватним або вимагає дослідних даних. Тому для прогнозу властивостей речовини необхідно вдосконалення врахування її властивостей.

**Характерні температури речовини.** Оскільки за рахунок міжмолекулярної взаємодії у речовині утворюються макромолекулярні структури у вигляді кластерів – виникає зміна еквівалентної довжини молекули-кластеру. Такий підхід до прогнозування властивостей речовини знаходить відбиття у багатьох дослідженнях, але при цьому не наголошується на універсальності такого підходу та його зв'язку з будовою речовини.

Оберемо для аналізу температуру плавлення ( $t_{пл}$ ) речовин ряду n-alkanів. Залежність зміни  $t_{пл}$  від кількості атомів карбону до  $n_C = 23$  (рис. 1) демонструє декілька рівнів періодичності для «парних» та «непарних» молекул та різний кут нахилу ліній

апроксимації для гомологічних «сусідів». Так,  $t_{пл}$  наступного алкану за «парним» є більшою на 9–3 °С, в той час як попереднього – на 39–3,5 °С меншою ( $\Delta t$  зменшуються з ростом  $n_C$ ). Також, до  $n_C = 8$  (лінія «а») для «парних» молекул та до  $n_C = 7$  для «непарних» (лінія «б») – спостерігаються суттєво різні тенденції зростання  $t_{пл}$ . Крім того, для алканів з  $n_C = 4–11$  для послідовних пар «сусідів» по гомологічному ряду має місце почергово різний кут нахилу тенденції зростання для  $t_{пл}$  (серія ліній «в»). Окрема аномалія спостерігається для перших представників гомологічного ряду: за апроксимацією залежності для метану очікувана  $t_{пл} \approx -240$  °С, а фактична  $t_{пл} = -182,5$  °С, в етану очікувана  $t_{пл} \approx -195$  °С, а фактична  $t_{пл} = -183,3$  °С. На підставі значень молярних мас здійснено апроксимацію вказаної залежності, формула (1).

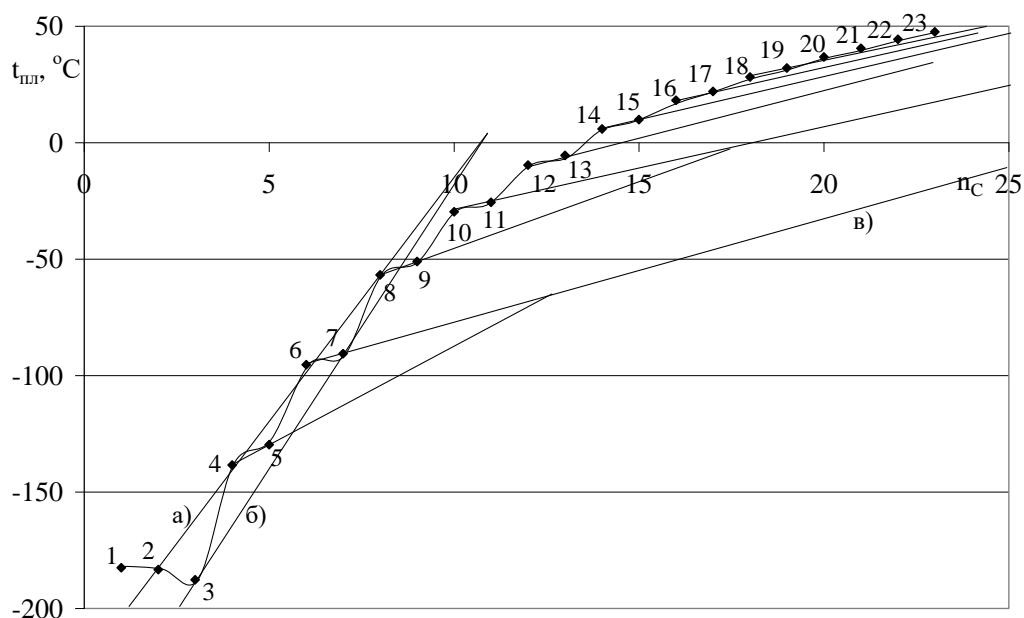


Рисунок 1. Зміна  $t_{пл}$  для гомологічних «сусідів» в ряді n-алканів від «1» – метану до «23» – трикозану

$$t_{пл} = \frac{30000}{(\mu^{0,91} + 41)} + \frac{3900}{(\mu^{1,05} - 0,4)^2} - \frac{\mu}{150} + 162, \text{ } ^\circ\text{C}. \quad (1)$$

Для n-алканів в діапазоні  $n_C = 1 \div 100$  отримано кореляцією з довідковими даними  $R = 0,999$  та середню похибку 8,9 °С. Тобто формула (1) враховує особливості будови n-алканів.

**Висновок.** Показано наявність коливального характеру зростання температур плавлення у гомологічному ряду n-алканів та окремих залежностей для «парних» та «непарних» молекул за кількістю атомів карбону. При апроксимації залежності для температур плавлення отримано  $R = 0,999$  з опосередкованим урахуванням будови речовини.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Litinskii G.B. Statistical thermodynamics of mixtures of polar liquids in the model of hindered rotation of molecules. *Journal of Physical Chemistry*. 2008, V.82, № 9, P. 1475–1479.
2. Greenshields J.B., Rossini F.D. Molecular structure and properties of hydrocarbons and related compounds. *Journal of Physical Chemistry*. 1958. №62. P. 271–280.
3. Tarzimanov A.A., Gabitov F.R. An investigation of the thermophysical properties of a liquid in a flow using the method of pulse heating. *High temperature*. 2004. V.42. №2. P. 231–237.
4. Киреев А.А., Трегубов Д. Г., Лещева В.А. Исследование тушения спиртов сухим и смоченным пеностеклом. *Проблемы ПБ*. №47. 2020. С.35–44. URL: <http://repositc.nuczu.edu.ua/handle/123456789/10942>.