

ЗАВИСИМОСТИ МОЛЯРНОГО ОБЪЕМА И МОЛЯРНОЙ ИЗОБАРНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ 1-АЛКЕНОВ ОТ ИХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ

В. С. Самуйлов

Могилевский государственный университет продовольствия, Беларусь

В настоящее время, несмотря на развитие различных методов моделирования, по-прежнему нерешенной остается задача построения универсальных моделей, описывающих свойства жидкостей. В то же время, для отдельных гомологических рядов могут быть найдены простые количественные соотношения между структурой и свойствами жидкости, позволяющие описывать и прогнозировать свойства с точностью сопоставимой с точностью эксперимента.

На основании анализа имеющихся литературных данных было обнаружено, что зависимости молярного объема \bar{v} и молярной изобарной теплоемкости \bar{c}_p жидких 1-алкенов при атмосферном давлении и на линии насыщения от их молекулярной массы m_r имеют характер близкий к линейному.

$$\bar{v} = [A + Bm_r + C(D + M_r)], \quad (1)$$

$$\bar{c}_p = \bar{c}_{p0} [F(M_r - M_{r0}) + 1 + (M_r - M_{r0})/G], \quad (2)$$

где $a, b, c, d, \bar{c}_{p0}, f, g$ – функции температуры; m_{r0} – константа.

При помощи уравнения (1) были обработаны значения молярного объема 1-алкенов от гексена до гексадецена в интервале температур 173–433 К. Для нахождения коэффициентов уравнения (2) использовались величины изобарной теплоемкости 1-алкенов от гексена до гексадецена при температурах 155–493 К.

Среднеквадратичное отклонение исходных значений от сглаженных при помощи уравнения (1) составляет 0,15% и максимальное 0,56%. Среднеквадратическое отклонение исходных значений от рассчитанных по уравнению (2) составило 0,37% и наибольшее 2,7%, что в основном находится в пределах погрешности измерений.

Чтобы оценить интерполяционные и экстраполяционные способности (1) и (2), была выполнена, повторно, аппроксимация исходных значений только для четырех алкенов. Уравнение (1), с полученными таким образом коэффициентами, описывает массив значений для одиннадцати алкенов от 1-гексена до 1-гексадецена со среднеквадратичным отклонением 0,15% и максимальным 0,59%, а уравнение (2) с отклонениями 0,46% и 2,3% соответственно.

Зависимости (1) и (2) могут быть использованы для расчета и прогнозирования величин молярного объема и молярной изобарной теплоемкости жидких 1-алкенов с числом атомов углерода более пяти при атмосферном давлении и на линии насыщения при температурах 173–433 К и 155–493 К соответственно.