**УДК 536.71 : 536.423**

*Н.С. Ульченко, студентка гр. 101-НГ*

*А.Т. Лобурець, к.ф.-м.н., доц.*

*асистент С.О. Заїка*

*Полтавський національний технічний університет*

*імені Юрія Кондратюка*

**АНАЛІЗ ВПЛИВУ БУДОВИ МОЛЕКУЛ АЛКАНІВ ТА ПЕРФЛУОРАЛКАНІВ НА ЇХНІ КРИТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ**

Ацентричний фактор залежить від асиметрії молекул [1]. Його величина характеризує відхилення *pVT* властивостей реального газу від властивостей ідеального. Ацентричний фактор дорівнює нулю в ідеальних газів, є близьким до нуля у метану та нелінійно зростає зі збільшенням у молекулі алкану кількості груп «– СН2 –». По суті, ацентричний фактор дозволяє врахувати усереднене значення сильно анізотропного потенціалу парної взаємодії залежно від взаємної орієнтації асиметричних молекул у момент їхнього зіткнення. Ми вирішили порівняти залежності термодинамічних властивостей від кількості атомів карбону у речовин, що мають ідентичні структурні формули. Такими є алкани та перфторалкани.

Кац і Фірозабаді (1978) представили узагальнений набір властивостей алканів для чистих компонентів з кількістю вуглецю в діапазоні від 6 до 50 атомів карбону. Уітсон (1983) змінив цей набір, застосувавши модифікацію, що базувалася на кореляції для невизначених фракцій нафти Ріазі та Даубера (1987). У програмному забезпеченні PhysProp v. 1.6.1, G & P Engineering Software, що спеціалізується на наданні високоякісного програмного забезпечення в галузі хімічного машинобудування, для фахівців приводиться повний набір фізичних властивостей 6500 чистих речовин, в тому числі і для алканів [2].

Ми здійснили спробу порівняти результати цих двох підходів з метою оцінки можливості внесення корективів у методи обчислення ацентричного фактора виходячи з позицій принципу термодинамічної подібності [3, 4].

Хімічні властивості флуору і гідрогену сильно відрізняються. Коротко зупинимося на властивостях елементарного флуору. Це необхідно для кращого розуміння незвичайних властивостей його сполук. Атом флуору (*F*) характеризується високою електронегативністю, відносно невеликим розміром і дуже низькою поляризаційною здатністю. За шкалою Полінга флуор має електронегативність – 4,0. Це найнижче значення в усій таблиці Менделєєва. Екстремальна електронегативність призводить до притягування флуором електронів із сусідніх атомів. При цьому утворюються полярні зв'язки. Наприклад, різниця електронегативностей між флуором та вуглецем становить 1,5 одиниці. Тому електрони розподіляються нерівномірно між двома атомами. На атомах флуору виникає частково негативний заряд, а на атомах карбону – частково позитивний заряд. Включення атомів флуору в органічні речовини призводить до різких змін фізичних властивостей, а також хімічної реактивності молекул. Залежно від місця та рівня флуорування сполуки органофлуору мають властивості розчинника. Вони стають більш летючими, ніж вихідний вуглеводень, якщо довжина ланцюга перевищує чотири атоми карбону. Сильне електронне відштовхування сусідніх атомів флуору робить жорстким вуглецевий ланцюг молекул флуоралканів. Це пов’язано з великими негативними зарядами кожного атома флуору і проявляється в тому, що тиски парів цих речовин є суттєво вищими, ніж у відповідних алканів [5]. Вивчивши амплітуду прямолінійного діаметра для великої кількості нормальних характеристик, Сінгх і Пітцер [6] виявили, що нахил прямолінійного діаметру бінодалі має лінійну залежність від ацентричного фактора, що визначається формою потенціалу парної взаємодії молекул. Порівняння температури кипіння благородних газів, перфлуоралканів та відповідних нормальних алканів вказує на те, що завжди перфлуоралкан буде більше подібним до інертних газів, ніж відповідний алкан.

Поєднуючи інформацію про фізико-хімічні властивості алканів та перфлуоралканів, які не утворюють групи термодинамічно подібних речовин, ми здійснили спробу застосувати одержаний нами аналітичний вираз рідинної вітки бінодалі [4] для обчислення ацентричного фактора за експериментально одержаними результатами парорідинної рівноваги речовин без прив’язки до значення приведеної температури, як про це повідомляється у роботі [2].

*Література*

*1. Филиппов Л.П. Подобие свойств веществ / Филиппов Л.П. // М.: Изд-во МГУ, 1978. – 256 с.*

*2. Hassan S. N. Characterizin Pure and Undefined Petroleum Components // International Journal & Technology. – 2010. – Vol. 10, № 2. – P. 28-48.*

*3. Guggenheim E. A. The Principle of Corresponding States // Journal of Chemical Physics. – 1945. – Vol. 13, № 7. – P. 253–261.*

*4. Лобурець А.Т. Заїка С.О. Визначення критичних параметрів тугоплавких речовин за даними низькотемпературної області рідкої фази. Збірник наукових праць за матеріалами X Міжнародної науково-практичної конференції / Проблеми й перспективи розвитку академічної та університетської науки 6-8 грудня 2017 року, Полтава, ПолтНТУ, 2017.*

*5. Dias A. M. A., Pàmies J. C., Coutinho J. A. P., Marrucho I. M., Vega L. F. SAFT Modeling of the Solubility of Gases in Perfluoroalkanes // J. of Phys. Chem. B. – 2004. – Vol. 108. – P. 1450.*

***6****.**Singh R. R. and Pitzer K. S. Rectilinear diameters and extended corresponding states theory // J. Chem. Phys. – 1990. – Vol. 92. – P. 3096.*