

Системы дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 12-24$): расчет, эксперимент, анализ

© Лаврентьева⁺ Ольга Владимировна, Гаркушин^{*+} Иван Кириллович,
Казакова Анна Игоревна

Кафедра «Общая и неорганическая химия». Самарский государственный технический
университет. ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Россия.

Тел.: +7 (846) 278-44-77. E-mail: gik49@yandex.ru ; olav1965olga@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: дифенил, n -алканы, методы расчета, фазовые равновесия, эвтектика.

Аннотация

Рассчитаны координаты эвтектик в двухкомпонентных системах дифенил – n - C_nH_{2n+2} с помощью уравнения Шредера, методов UNIFAC и UNIFAC Dortmund, расчетно-экспериментальным методом. Расчетно-экспериментальный метод реализован в двух вариантах. Каждый вариант при аналитическом описании использует два ряда систем – с четным и нечетным числом атомов углерода в молекуле n -алкана. В первом варианте использованы экспериментальные данные по первым трем членам ряда (ряд 1 $n = 12, 14, 16$; ряд 2 $n = 13, 15, 17, n$ – число атомов углерода в молекуле n - C_nH_{2n+2}). По полученным экспериментальным данным проведены аналитическое описание и расчет температур плавления двойных эвтектик в системах дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 18, 20, 22, 24$) и дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 19, 21, 23, 25$). Во втором варианте в первом и втором рядах экспериментально исследованы системы через четыре атома углерода (дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 12, 16, 20, 24$; $n = 13, 17, 21$)). Аналитическое описание и расчет температур плавления эвтектик проведено аналогично варианту 1. Выполнена сравнительная оценка всех методов расчета по абсолютным и относительным отклонениям расчетных и экспериментальных данных. С учетом экспериментальных данных описаны аналитически и построены графические зависимости температур плавления эвтектик от числа атомов углерода в молекуле n -алканов, от температур плавления n -алканов и взаимосвязь температур плавления эвтектик с нечетным числом атомов углерода с температурами плавления эвтектик с четным числом атомов углерода. Полученные уравнения позволяют рассчитать температуры плавления эвтектик с числом атомов углерода более 24 в молекуле n -алкана. Эвтектические смеси могут быть использованы в качестве теплоносителей и теплоаккумулирующих веществ.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Лаврентьева О.В., Гаркушин И.К., Казакова А.И. Системы дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 12-24$):
расчет, эксперимент, анализ. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.78. №4. С.15-27. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-4-15

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Лаврентьева О.В., Гаркушин И.К., Казакова А.И. Системы дифенил – n - C_nH_{2n+2} ($n = 12-24$):
расчет, эксперимент, анализ. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.7. №2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-4-15/ROI-jbc-RA/24-7-2-2

The output for citing the English online version of the article:

Olga V. Lavrenteva, Ivan K. Garkushin, Anna I. Kazakova. Diphenyl - n - C_nH_{2n+2} ($n = 12-24$) systems:
calculation, experiment, analysis. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.7. No.2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-4-15/ROI-jbc-A/24-7-2-2