

Тематическое направление: Численная характеристика структуры органической молекулы.
Часть 18.

К вопросу о движении молекул неэлектролитов

© **Урядов Владимир Георгиевич**

*Кафедра органической химии. Казанский государственный технологический университет.
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Россия. Тел.: (8432) 63-87-95. E-mail: uryadov@kstu.ru*

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: топологический индекс, вращательное движение, сила тяготения, теплоемкость, вязкость.

Аннотация

Рассмотрены некоторые формы движения молекул неэлектролитов, а также роль силы Земного тяготения в природе межмолекулярных взаимодействий. На основании уравнения состояния идеального газа и выражения закона всемирного тяготения получена формула линейной взаимосвязи температуры ансамбля молекул и молярной массы молекул, его составляющих. Фактическая зависимость экспериментальных значений температуры кипения ряда алканов нормального строения от молярной массы задается плавной выпуклой кривой. На основании анализа зависимостей температуры кипения спиртов, циклоалканов, полигалогеналканов, включающие атомы водорода в состав молекулы, и пергалогеналканов высказано предположение, что основу взаимодействия молекул в жидкой фазе, воспринимаемого как дисперсионное – составляет равновесие между силой притяжения к Земле и отталкиванием электронных оболочек молекул. На основании изложенных представлений о проявлении межмолекулярных взаимодействий построены уравнения регрессии, определяющие температуру кипения алканов нормального строения как функцию молярной массы и, введенного ранее нами энерго-структурного параметра, а также как функцию молярной массы, энерго-структурного параметра и величины J_w , – параметра, введенного нами, с позиций вращательного движения молекул, для описания физико-химических свойств жидкостей. Наряду с вращательным движением рассмотрено движение молекул в жидкости по замкнутым траекториям, предельным случаем которых является окружность. Для ряда алканов нормального строения определены значения радиуса окружности на основании данных по плотности при различных температурах. Установлено наличие взаимосвязи квадрата радиуса с теплоемкостью рассматриваемых алканов. Построенные графические зависимости включают два выраженных участка. Один практически параллельный оси абсцисс, указывающий на отсутствие зависимости теплоемкости от радиуса. Другой участок представляет собой линейную зависимость теплоемкости от квадрата радиуса. Первый участок графических зависимостей соотносится с квазикристаллической жидкостью. Второй участок рассматривается как газоподобная жидкость. Также получены зависимости обратной вязкости алканов от куба радиуса. Данные зависимости рассматриваются как указание на интенсификацию массопереноса в жидкости с ростом температуры. На основании полученных зависимостей высказано предположение об особенностях природы жидкой фазы.