

# ТЕМПЕРАТУРИ ПЛАВЛЕННЯ ВУГЛЕВОДНІВ ЯК ІНДИКАТОР КЛАСТЕРНОЇ БУДОВИ

## HYDROCARBONS MELTING TEMPERATURES AS CLUSTERS STRUCTURE INDICATOR

*Доц., к.т.н. Д.Г. Трезубов, студ. (І рівень) Ф.Д. Трезубова*

*Національний університет цивільного захисту України*

**Анотація.** На підставі відомих температур плавлення вуглеводнів (алканів, алкенів, алкінів, циклоалканів) запропоновано можливу будову кластерів. Розроблено принцип розрахунку довжини кластера.

**Ключові слова:** вуглеводні, кластер, еквівалентна довжина ланцюга, температура плавлення.

**Annotation.** On the basis of the known hydrocarbons melting points (alkanes, alkenes, alkynes, cycloalkanes), a possible structure of the clusters is proposed. The principle of determining the cluster length has been developed.

**Keywords:** hydrocarbons, cluster, equivalent chain length, melting point.

**Вступ.** Технологічні умови використання речовин та їх небезпека визначаються властивостями, які пов'язані з наявністю міжмолекулярної взаємодії. Так, фазові перетворення відбуваються за певних характерних температур, за яких енергія у системі перевищує рівень енергії міжмолекулярної взаємодії. На нашу думку при цьому руйнується певна кластерна будова речовини. Таким чином, властивості речовини визначаються її кластерною будовою, що потребує встановлення відповідних залежностей.

**Актуальність.** Температури плавлення ( $t_{пл}$ ) вуглеводнів нормальної будови відносяться до найбільш досліджених параметрів речовини у твердому стані. Відзначають їх коливальний характер для молекул з «парною» та «непарною» кількістю атомів карбону [1] та для масових швидкостей вигорання н-спиртів та н-алканів [2]. Це свідчить про різницю будови кластерів для «парних» та «непарних» молекул, що можна описати «еквівалентною довжиною» кластеру. У практичних розрахунках температур плавлення коливальність властивостей речовини в одному гомологічному ряді на даний час не враховується, що робить відповідний розрахунок неадекватним [3]. Тому для прогнозу властивостей речовини необхідно враховувати її надмолекулярну будову, наприклад, на підставі параметру описати «еквівалентна довжина» кластеру.

**Розрахунок температур плавлення вуглеводнів.** За рахунок міжмолекулярної взаємодії у речовині утворюються макромолекулярні структури у вигляді кластерів з іншою еквівалентною довжиною  $n_{екв}$ , ніж у молекули. Більш того, внаслідок наявності кута взаємодії агрегування у середовищі «парних» та «непарних» молекул відбувається за різними механізмами, для яких іноді створюють окреме прогнозування. Але помічено, що властивості вуглеводнів не завжди підкоряються цьому принципу, тому

з'ясування надмолекулярної будови для кожної речовини у гомологічних рядах є альтернативним шляхом для адекватного прогнозування властивостей.

Для вуглеводнів проведено пошук можливих кластерних будов, що корелюють з відповідними  $t_{пл}$ . Розглядалися варіанти лінійної й циклічної будови та вплив різної молекулярної маси на зміну  $t_{пл}$  за однакової довжини прогнозованого кластеру. Еквівалентна довжина кластеру визначалась за найдовшим карбоновим ланцюгом у його будові.

Проведене моделювання виявило наявність кластерів у гомологічних рядах алканів, алкенів, алкінів та циклоalkanів нормальної будови – від димерів до гексамерів. Для алканів прийнято, що перші два гомолога мають більш складну будову кластеру ніж димер, а кластеризація відбувається лінійно. Для «непарних» алканів, крім метану та пропану, прийнято кластеризацію через положення «2» в карбоновому ланцюзі, що зменшує довжину кластеру на «1» та відповідно й  $t_{пл}$ . Стабілізація коливань  $t_{пл}$  алкенів свідчить про принципово однакову будову кластерів (крім етену та пропену) – як паралельне «накладання» частин молекул одна на одну, що зменшує  $n_{Секв}$  та  $t_{пл}$ . Ступінчастість  $t_{пл}$  виникає внаслідок різної міри «накладання» різних молекул. Для більшості алкінів прийнято, що кластеризація відбувається по місцю «2», «3», або «4» в карбоновому ланцюзі в залежності від довжини молекул. Обрана схема моделювання привела до того що кластери «непарних» алкінів мають однакову довжину з відповідними алканами, а парні виявляються коротшими. Для циклоalkanів прийнято лінійну кластеризацію від три- до гексамерів. При цьому довжина кластеру обирається від одного геометрично кінцевого карбону до іншого за більш довгим боком циклу відносно місць кластеризації з додаванням залишкових карбонів одного з кінцевих циклів (тобто кластеризація відбувається не за геометрично боковими карбонами циклу). Залежність зміни  $n_{Секв}$  від кількості карбонів у молекулі корелює із залежністю для  $t_{пл}$  для гомологічних рядів досліджених вуглеводнів.

**Висновок.** Розроблено принципи прогнозування коливальних змін властивостей твердого стану речовини у гомологічних рядах вуглеводнів. Показано, що ряд значень температур плавлення корелює не з довжинами карбонових ланцюгів молекул або їх молярними масами, а з еквівалентними довжинами запропонованих схем кластерів.

## ЛІТЕРАТУРА

1. 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.
2. Tregubov D.G., Tarakhno O.V., Trehubova F.D. Nonlinearity of mass velocities of burning for hydrocarbons from different homological series. *Emergency protection*. Svetlaya Roshcha: IRUQ, 2021. P. 155–159. URL: <http://repositsc.nuczu.edu.ua/handle/123456789/13565>.
3. Трегубов Д.Г., Тарахно О.В., Киреев О.О. Вплив кластерної будови технічних сумішей рідин на значення характерних температур. *Проблеми надзвичайних ситуацій*. №28. 2018. С. 99–110.