

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ЭНТАЛЬПИЯ НАСЫЩЕННЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ (АЛКАНОВ) В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА*

Н. М. Кузнецов¹, С. М. Фролов²

Аннотация: Предложены аналитические зависимости теплоемкости и энтальпии насыщенных углеводородов в состоянии идеального газа от температуры и от числа атомов углерода в молекуле до $n = 20$. Зависимости основаны на анализе структуры химических связей радикалов в молекулах насыщенных углеводородов. Так, увеличение числа n на единицу при начальном значении $n \geq 2$ соответствует добавлению в молекулу одного радикала CH_2 . При $n \geq 4$ ближайшими соседями добавляемого радикала могут быть только радикалы CH_2 , так как у краевых радикалов CH_3 такие соседи уже имеются. В таком случае молекула $\text{C}_{n+1}\text{H}_{2n+4}$ отличается от молекулы $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ в структурном отношении тем, что в ней число радикалов CH_2 , не соседствующих с краевыми радикалами, на единицу больше. Поэтому с точностью до взаимодействия с более далекими соседями добавление радикала CH_2 при $n \geq 4$ приводит к линейной зависимости теплоемкости и энтальпии от числа n на изотермах. Получено хорошее согласие с табличными данными: погрешность вычисления теплоемкости и энтальпии в интервале 298,16–1500 К для алканов выше n -бутана сравнима с погрешностью четырехзначных справочных данных и составляет не более 0,1%.

Ключевые слова: алканы; теплоемкость; энтальпия; идеальный газ; аналитическая зависимость; погрешность аппроксимации

DOI: 10.30826/CE20130212

Литература

1. *Варгафтик Н. Б.* Справочник по теплофизическим

свойствам газов и жидкостей. — 1-е изд. — М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. 708 с.

Поступила в редакцию 12.03.2020

* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5, и субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0005 «Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем» (номер государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6), а также частично при поддержке РФФИ (грант № 18-08-00076а).

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, N-M-Kuznetsov@yandex.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru