

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Бендюков В.Б., Мамусина Ю.Н. Силы межмолекулярного взаимодействия и соотношения между ними // Академия педагогических идей «Новация». Серия: Студенческий научный вестник. – 2017. – № 01 (январь). – АРТ 02-эл. – 0,1 п.л. - URL: <http://akademnova.ru/page/875550>

РУБРИКА: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 544.03

Бендюков Виктор Борисович,

студент 4 курса, факультет Химических технологий

ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный аэрокосмический университет
им.

М.Ф. Решетнева»

г. Красноярск, Российская Федерация

e-mail: viktorbendyukov@gmail.com

Мамусина Юлия Николаевна,

студентка 4 курса, факультет Химических технологий

ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный аэрокосмический университет
им. М.Ф. Решетнева»

г. Красноярск, Российская Федерация

e-mail: yulia-mamusina@mail.ru

СИЛЫ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ НИМИ

Аннотация: В статье рассмотрены силы межмолекулярного взаимодействия в нефтяных дисперсных системах на основе уравнения

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

потенциала межмолекулярного взаимодействия, являющегося функцией расстояния.

Ключевые слова: сила межмолекулярного взаимодействия, ММВ, уравнение, сложная структурная единица, ССЕ, энергия ММВ, нефтяная дисперсная система.

Bendyukov Viktor Borisovich

4th year student, Faculty of Chemical Technology

VPO "Siberian State Aerospace University.

M. F. Reshetnev "

Krasnoyarsk, Russian Federation

e-mail: viktorbendyukov@gmail.com

Mamusina Yulia Nikolaevna

4th year student, Faculty of Chemical Technology

VPO "Siberian State Aerospace University.

M. F. Reshetnev "

Krasnoyarsk, Russian Federation

e-mail: yulia-mamusina@mail.ru

INTERMOLECULAR FORCES AND THEIR RELATIONSHIP

Abstract: The article describes the intermolecular forces in oil disperse systems based on the equation intermolecular interaction potential, which is a function of the distance.

Keywords: the power of intermolecular interaction, PII, equation, complex structural unit, CSU, the energy of the PII, the oil dispersion.

С проявлением межмолекулярных сил приходится сталкиваться как при рассмотрении поведения нефтяных газов, так и при изучении процессов взаимодействия молекул в жидких нефтяных средах, а также при исследовании процессов адсорбции на поверхности нефтяного углерода и т.д. Таким образом, рассмотрение сил межмолекулярного взаимодействия является очень важной особенностью в изучении всей нефтехимии.

В основу теории строения ССЕ положена концепция убывания потенциала межмолекулярных взаимодействий по мере удаления от центра ССЕ и приближения к ее периферии. Поэтому совершенно необходимо краткое изложение современных представлений о молекулярных силах, действующих между молекулами нефтяных компонентов.

В настоящее время не существует устоявшейся классификации сил межмолекулярного взаимодействия. Некоторые авторы подразделяют их на физические, определяемые физическими характеристиками взаимодействующих молекул, и химические, приводящие к образованию направленных химических и квазихимических связей. Межмолекулярные взаимодействия подразделяют на универсальные и специфические, и так же классифицируют их на взаимодействия ближнего и дальнего порядка. Все классификации достаточно условны, поскольку взаимодействия имеют единую природу, и в их основе лежат электростатические и электродинамические взаимодействия ядер и электронов атомов, входящих в молекулы.

Для оценки потенциала, или энергии межмолекулярного взаимодействия E , используют следующую процедуру: выбирают соответствующий модельный потенциал, параметры которого подгоняют с учетом того, чтобы расчеты с этим модельным потенциалом удовлетворяли

экспериментальным данным, полученным при исследовании макроскопических свойств системы.

В общем случае потенциал межмолекулярного взаимодействия $E(R)$ может быть представлен потенциальной кривой взаимодействия от расстояния R между молекулами. Если учитывать, что взаимодействующие молекулы фиксированы в пространстве, то появляется еще одна координата, связанная с взаимным расположением молекул, ϕ . Тогда межмолекулярному потенциалу $E(R, \phi)$ соответствует потенциальная поверхность, построенная на основе соответствующей системы уравнений. В общем случае выражение для потенциала межмолекулярного взаимодействия, являющегося функцией расстояния имеет следующий вид:

$$E(R) = \pm K e^{-k_0 R} \pm K_1 R^{-1} \pm K_2 R^{-2} \pm K_3 R^{-3} \pm K_4 R^{-4} \pm K_5 R^{-5} - K_6 R^{-6} \quad (1)$$

Где K, K_0, \dots, K_6 – коэффициенты при членах разложения.

Представление энергии взаимодействия в виде суммы различных членов позволяет выделить составляющие, дающие наибольший вклад в данной области расстояний. Первым членом уравнения описываются так называемые короткодействующие силы межмолекулярного взаимодействия, проявляющиеся на малых расстояниях. Они уменьшаются по экспоненциальной зависимости с возрастанием расстояния R и возникают в результате перекрывания электронных волновых функций, отвечающих отдельным атомам или молекулам. Вклад первого члена уравнения в величину $E(R)$ является наибольшим и представляет собой энергию образования ковалентной связи гомео или гетерополярного типа. Короткодействующие силы, также как большинство других сил взаимодействия, могут быть силами притяжения или отталкивания, что отражается в уравнении знаками « \pm ». В том случае, когда два атома

взаимодействуют с образованием молекулы, возникает очень большая коротко действующая сила притяжения, которая приводит к минимуму энергии при характерных межъядерных расстояниях.

Представленные в уравнении (1) члены, изменяющиеся по закону R^{-n} (n - это целое положительное число), относятся к дальнодействующим силам. Составляющие последних, описываемые вторым и третьим членам уравнения (1) и обусловленные соответственно кулоновским взаимодействием ионов между собой и ионов с незаряженными частицами, в нефтяных системах с ковалентными молекулами не обнаруживаются ввиду отсутствия в них ионов.

Четвертый член в уравнении (1) отражает вклад в величину $E(R)$ энергии резонансного взаимодействия, которая возникает при взаимодействии свободных радикалов с диамагнитными молекулами, а также энергии диполь-дипольного взаимодействия. Для реальных нефтяных систем, в составе которых имеются смолисто-асфальтеновые вещества, характерны специфические взаимодействия свободных радикалов. Концентрация парамагнитных центров в асфальтенах достигает 10^{19} - 10^{20} спин/г, энергия их взаимодействия с диамагнитными молекулами близка к энергии ковалентных связей. В работах Ф.Г. Унгера, посвященных парамагнетизму нефтяных систем, утверждается, что ассоциативное строение нефтяных систем обусловлено главным образом обменными и резонансными взаимодействиями, энергия которых может достигать 400 кДж/моль.

Пятый и шестой члены соответствуют электростатическим мультиполь-мультипольным взаимодействиям диамагнитных молекул, к которым относятся многие углеводороды нефти, например алканы, цикланы, бензол и др.

Последний член уравнения (1) $-K_6R^{-6}$ характеризует Ван-дер-Ваальсовое притяжение молекул, являющееся результатом действия ориентационных, индукционных и дисперсионных сил. Константа межмолекулярного притяжения K_6 в общем случае включает три составляющие, описывающие соответственно взаимодействие двух постоянных диполей (ориентационное взаимодействие), диполя с неполярной молекулой (индукционное взаимодействие) и взаимодействие двух неполярных молекул.

Компоненты нефтяных систем можно разделить по величине статической или диэлектрической проницаемости (ϵ_s) на неполярные ($\epsilon_s \leq 2,0-2,3$) и малополярные ($\epsilon_s \leq 4,5-5,5$).

Природа дисперсионного взаимодействия двух неполярных молекул с позиций квантовой механики заключается в том, что случайные флуктуации электрического поля молекулы приводят к появлению переменного диполя, способного индуцировать диполи в соседних молекулах. Существенной особенностью дисперсионных сил притяжения в отличие от ориентационных и индукционных является их аддитивность в отношении парных взаимодействий молекул.

При определенных условиях суммарное действие межмолекулярных сил приводит к так называемому стэкинг-взаимодействию. В стопообразной упаковке плоских молекул, расположенных на ван-дер-ваальсовых расстояниях друг от друга, имеет место стэкинг-взаимодействие, известное для биомолекул типа ДНК. По-видимому, стэкинг-взаимодействия в асфальтенах, возникающее между содержащимися в их составе ареновыми фрагментами, карбоксильными и аминогруппами ответственно за формирование их пачечной кристаллоподобной структуры.

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Надо заметить, что ни в одном эксперименте межмолекулярные силы непосредственно не измеряются. Для оценки межмолекулярного взаимодействия применяют методы, основанные на данных по энтальпиям испарения и растворения, второму вириальному коэффициенту, вискозиметрии, диэлькометрии.

Одним из основных параметров оценки межмолекулярного взаимодействия компонентов нефти, удобных для практических целей, является плотность энергии когезии, численно равная отношению энтальпии испарения жидкого компонента к его мольному объему.

Список использованной литературы:

1. Сюняев З. И., Сафиева Р. З., Сюняев Р. З. Нефтяные дисперсные системы. - М.: Химия, 1990. - 226 с.
2. Межмолекулярные взаимодействия // Химическая энциклопедия. Т. 3. — М.: Большая Российская энциклопедия, 1992. С. 12-15
3. Каплан И. Г. «Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий» М.: Наука, 1982. 312с
4. Бараш Ю. С. Силы Ван-дер-Ваальса. — М.: Наука, 1988. — 344 с.

Дата поступления в редакцию: 02.01.2017 г.

Опубликовано: 04.01.2017 г.

© Академия педагогических идей «Новация». Серия «Студенческий научный вестник», электронный журнал, 2017

© Бендюков В.Б., Мамусина Ю.Н., 2017