

УДК 537.226.83:535.324.1

РАСЧЕТ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ЖИДКИХ Н-АЛКАНОВ ДЛЯ КРАСНОЙ ЛИНИИ ВОДОРОДА

Шуваева О.В.

ФГБОУ ВПО «Тульский государственный университет», Тула, e-mail: shuvaeva9@rambler.ru

Развита методика расчета показателей преломления в гомологическом ряду жидких н-алканов для красной линии водорода при температуре 20 °С на основе данных о светорассеянии в электрическом поле высокой напряженности. Предложен способ расчета показателя преломления n_C^{20} в зависимости от числа атомов углерода в молекуле н-алкана, позволяющий получать результаты с приемлемой степенью точности.

Ключевые слова: н-алканы, электрическое поле высокой напряженности, светорассеяние, показатель преломления

CALCULATION OF THE INDEXES OF REFRACTION OF LIQUID N-ALKANES FOR THE RED LINE OF HYDROGEN

Shuvaeva O.V.

Tula State University, Tula, e-mail: shuvaeva9@rambler.ru

A new method of calculation of the indexes of refraction of n-alkanes for the red line of Hydrogen on the basis of a data of light transmission in the strong electric field are proposed for the temperature of 20 °С are proposed. A calculation scheme for quantitative estimation of the indexes of refraction in dependence of the quantity carbons atoms in the molecule of n-alkane are developed.

Keywords: n-alkanes, high-strength electric field, light transmission, index of refraction

Как показал анализ литературных данных, большинство имеющихся в справочной литературе значений показателей преломления органических жидкостей для красной линии водорода при температуре 20 °С характеризуются невысокой точностью, что не позволяет применять их для расчета некоторых аналитических параметров. Кроме того, для большого числа жидкостей значения n_C^{20} отсутствуют [1, 3]. В силу вышеуказанного теоретические методы расчета показателя преломления являются в настоящее время наиболее перспективными, поскольку исключают необходимые затраты на очистку и выделение исследуемых жидкостей.

Цель исследования

Целью настоящей работы является отработка и развитие методики, предложенной в работах [5–6], для расчета показателя преломления жидких н-алканов для красной линии водорода (n_C^{20}) в гомологическом ряду. Это позволит не только минимизировать систематические погрешности, но и оценить суммарную случайную погрешность предлагаемой методики.

Материалы и методы исследования

В качестве объектов исследования были выбраны жидкие н-алканы: н-нонан (C_9H_{20}), н-декан ($C_{10}H_{22}$), н-ундекан ($C_{11}H_{24}$), н-додекан ($C_{12}H_{26}$), н-гексадекан ($C_{16}H_{34}$). Выбор объектов исследования обусловлен следующими причинами:

- 1) жидкие н-алканы широко применяются в качестве растворителей;
- 2) жидкие н-алканы хорошо и всесторонне изучены. Значения их показателей преломления для жел-

той линии натрия при температуре $t = 20$ °С являются справочными данными [3].

Предложенная в данной работе методика расчета показателя преломления основана на явлении уменьшения светопропускания исследуемых жидкостей в электрическом поле высокой напряженности, экспериментально установленном в работе [7], что происходит за счет рассеяния света по механизму Рэлея. Для расчета показателей преломления n_C^{20} любых жидких гомологов ряда н-алканов были использованы результаты эксперимента, описанного в работе [7], в частности, значения светопропускания исследуемых н-алканов в электрическом поле высокой напряженности на длине волны $\lambda = 656,3$ нм. Жидкие н-алканы с меньшим числом атомов углерода в молекулах (н-гексан и н-гептан, н-октан), как показал эксперимент [7], не могут быть исследованы фотоэлектроколориметрическим методом, так как являются сильно летучими и не позволяют получать статистически стабильные результаты по светорассеянию в электрическом поле высокой напряженности.

Показатель преломления n_C^{20} н-алканов выражали из закона рассеяния Рэлея [5]:

$$n_C^{20} = \left(\sqrt{\frac{(T_0 - T) \cdot r^2 \cdot \lambda^4 \cdot N_1}{b \cdot V \cdot T_0}} + 1 \right)^{1/2}, \quad (1)$$

где $T_0 = 100\%$ – начальное светопропускание жидкости, не подвергавшейся воздействию электрического поля; T – светопропускание, которое устанавливалось в жидкости в результате воздействия на нее электрического поля, %; r – расстояние от центра рассеивающего объема V до точки наблюдения, м; λ – длина волны света, м; N_1 – число Лошмидта; b – коэффициент пропорциональности, устанавливаемый экспериментально [5]; V – рассеивающий объем.

При расчетах n_C^{20} по формуле (1) рассеивающий объем исследуемых жидкостей V принимали равным 18,48 мл (объем стандартной кюветы фотоэлектро-

колориметра), расстояние от центра рассеивающего объема до точки наблюдения $r = 0,0225$ м, начальное светопропускание $T_0 = 100\%$.

Как уже указывалось ранее [5, 6], фотоэлектродиметрический метод измерения светопропускания позволяет рассчитать значение показателя преломления с точностью до четвертого знака после запятой, поэтому изменение показателя преломления Δn в электрическом поле является величиной второго порядка малости, и им можно пренебречь.

Для теоретического расчета показателей преломления жидких н-алканов для красной линии водорода была построена зависимость $n_C^{20} = f(N_c)$, (N_c – число атомов углерода в молекуле н-алкана), где были использованы результаты расчета n_C^{20} по формуле (1):

$$n_C^{20} = 0,0495 \ln(N_c) + 1,2953. \quad (2)$$

Вычисление параметров зависимости $y = a \ln(x) + b$ проводилось методом наименьших квадратов. Логарифмический характер полученных зависимостей объясняется тем, что существуют предельные значения показателя преломления $n_C(\infty)$ [1].

Результаты исследования и их обсуждение

Значения показателей преломления жидких н-алканов для красной линии водорода n_C^{20} , рассчитанные по формуле (1) с использованием экспериментальных данных по светопропусканию исследуемых жидкостей в электрическом поле высокой напряженности, приведены в табл. 1. Здесь они сравниваются со справочными данными [3].

Результаты сравнения показателей преломления н-алканов n_C^{20} , рассчитанных по

формуле (2), со справочными значениями [3] приведены в табл. 2.

Как следует из табл. 1, сравнение значений показателя преломления для красной линии водорода жидких н-алканов в гомологическом ряду при температуре 20°C можно провести только для н-нонана и н-гексадекана (для н-декана, н-ундекана, н-додекана справочные данные отсутствуют [3]). Полученные погрешности лежат в пределах $0,003 \dots 0,129\%$, что не превышает максимальных погрешностей экспериментального определения и расчетных значений показателей преломления, предложенных другими авторами [1], и способных достигать $0,2-6,0\%$.

Справочные значения n_C^{20} для н-тридекана, н-тетрадекана и н-пентадекана отсутствуют [3]. $n_{\text{Срассч}}^{20}$, приведенные в табл. 2, получены с помощью расчетной схемы (2). Значения погрешностей (см. табл. 2) позволяют сделать вывод о том, что для трех указанных жидкостей они не превысят 1% . Известные на сегодняшний момент эмпирические уравнения для оценки, в частности, значений n_D^{20} [2, 4], приводят к максимальным погрешностям, лежащим в пределах $1 \dots 6\%$, что на порядок больше погрешностей, полученных для n_C^{20} в данной работе. Таким образом, значения n_C^{20} для жидких н-алканов в гомологическом ряду, полученные с помощью предложенной в данной работе расчетной схемы, можно использовать для различных физико-химических расчетов.

Таблица 1

Показатели преломления жидких н-алканов для красной линии водорода, рассчитанные по формуле (1)

Название жидкости	Химическая формула	$n_{\text{Сэсп}}^{20}$	$n_{\text{Ссправ}}^{20}$	$\Delta, \%$
н-нонан	C_9H_{20}	1,40338	1,40342	0,003
н-декан	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	1,40986	–	–
н-ундекан	$\text{C}_{11}\text{H}_{24}$	1,41507	–	–
н-додекан	$\text{C}_{12}\text{H}_{26}$	1,41735	–	–
н-гексадекан	$\text{C}_{16}\text{H}_{34}$	1,43421	1,43235	0,129

Таблица 2

Показатели преломления жидких н-алканов для красной линии водорода при температуре 20°C , рассчитанные по формуле (2)

N_c	$n_{\text{Срассч}}^{20}$	$n_{\text{Ссправ}}^{20}$	$\Delta, \%$
6	1,38399	1,37300	0,794
7	1,39162	1,38572	0,042
8	1,39823	1,39562	0,186
9	1,40406	1,40342	0,046
13	1,42226	–	–
14	1,42539	–	–
15	1,42935	–	–
16	1,43254	1,43235	0,013

Заключение

Предложена методика расчета показателя преломления жидких n-алканов для красной линии водорода при температуре 20 °С, которая обеспечивает приемлемую точность, не превышающую 0,80%. Развита схема расчета показателя преломления n_C^{20} в зависимости от числа атомов углерода в молекуле n-алкана, что позволяет избежать трудоемких экспериментов. Предложенную методику расчета предполагается развить для получения значений показателей преломления органических жидкостей для других длин волн и температур.

Список литературы

1. Иоффе Б.В., Зенкевич И.Г. Расчет показателей преломления и относительных плотностей в гомологических рядах органических соединений // ЖФХ. – 2000. – Т. 74, № 11. – С. 2101–2106.
2. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей / пер с англ. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
3. Справочник химика. Аналитическая химия, спектральный анализ, показатели преломления / под ред. Б.П. Никольского. – Л.: Химия, 1967. – Т. 4. – 920 с.
4. Столяров Е.Ф., Орлова Н.Г. Расчет физико-химических свойств жидкостей. – М.: Химия, 1976. – 112 с.
5. Шуваева О.В. Определение оптических характеристик органических жидкостей по светорассеянию в электростатическом поле высокой напряженности // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2013. – № 12. – С. 43–47.
6. Шуваева О.В. Расчет показателей преломления жидких n-алканов для желтой линии натрия // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2014. – Ч. 2, № 2. – С. 33–36.
7. Шуваева О.В. Оптико-поляризационные эффекты в жидких диэлектриках при действии электрического поля высокой напряженности: дис. ... канд. техн. наук. – Тула: ТулГУ, 2004. – 264 с.