**Термодинамическое моделирование систем фенилбензоаты – растворители**

***Краснопёров А.И., Пестов С.М.***

*Аспирант, 4 год обучения*

*Российский технологический университет МИРЭА, Институт тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: krasnopyorov13@bk.ru*

Фенилбензоаты (ФБ) входят в состав жидкокристаллических смесей для различных оптоэлектронных приборов. Для увеличения числа потенциальных областей применения необходимо обладать информацией о межмолекулярном взаимодействии ФБ как в различных смесях, так и в системах с немезогенами (растворитель, добавка).

В качестве объектов исследования были выбраны фенилбензоаты с общей формулой R-C6H4-COO-C6H4-OC4H9: Н-117, R = OC7H15; Н-134, R = OC9H19. Получены значения растворимости при 298.15 К (lnx1298.15) и политермы растворимости в разных растворителях. В таблице 1 представлены результаты для Н-117 (ΔплHo = 31.4 кДж/моль), Н-134 (ΔплHo = 38.0 кДж/моль), в виде уравнения (1).

(1)

где a = Δ пл.Ho/R, где x1 – мольная доля ФБ в насыщенном растворе при температуре Т [K], R – газовая постоянная, Δпл.Ho – расчетная энтальпия плавления (растворения).

Таблица 1. Результаты измерений

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| ФБ | Растворитель | a | b | lnx1298.15 | Δпл.Ho, кДж/моль | HE1, кДж/моль |
| Н-117 | *н*-гексан | –8755.9 | 24.391 | –4.976 | 72.8 ± 0.8 | 41.4 |
| *н*-гептан | –7954.30 | 21.766 | –4.913 | 66.1 ± 0.6 | 34.7 |
| диэтиловый эфир | –6191.60 | 17.734 | –3.033 | 51.5 ± 1.0 | 20.1 |
| диизопропиловый эфир | –9046.10 | 26.993 | –3.348 | 75.2 ± 0.8 | 43.8 |
| *трет*-бутилметиловый эфир | –6470.40 | 18.698 | –3.004 | 53.8 ± 0.6 | 22.4 |
| метилацетат | –7402.00 | 21.789 | –3.037 | 61.5 ± 0.5 | 30.1 |
| этилацетат | –6145.50 | 17.811 | –2.801 | 51.1 ± 0.5 | 19.7 |
| *н*-пропилацетат | –6103.30 | 17.720 | –2.751 | 50.7 ± 0.4 | 19.3 |
| *н*-бутилацетат | –5708.40 | 16.501 | –2.645 | 47.5 ± 0.2 | 16.1 |
| Н-134 | *н*-гексан | –9933.80 | 28.257 | –5.061 | 82.6 ± 1.2 | 44.6 |
| *н*-гептан | –9033.90 | 25.218 | –5.082 | 75.1 ± 0.7 | 37.1 |
| диэтиловый эфир | –5863.50 | 16.094 | –3.572 | 48.8 ± 0.8 | 10.8 |
| диизопропиловый эфир | –7812.20 | 22.474 | –3.728 | 65.0 ± 0.9 | 27.0 |
| *трет*-бутилметиловый эфир | –7423.50 | 21.656 | –3.243 | 61.7 ± 0.9 | 23.7 |
| метилацетат | –8310.60 | 24.321 | –3.553 | 69.1 ± 0.5 | 31.1 |
| этилацетат | –7143.30 | 20.652 | –3.307 | 59.4 ± 0.5 | 21.4 |
| *н*-пропилацетат | –7239.40 | 21.120 | –3.161 | 60.2 ± 0.4 | 22.2 |
| *н*-бутилацетат | –6695.00 | 19.467 | –2.988 | 55.7 ± 0.2 | 17.7 |

Для всех систем HE1 > 0, что свидетельствует о положительных отклонениях от модели идеального раствора. Для выбранных жидких кристаллов была рассчитана растворимость при 298.15 К с использованием параметров растворимости Гильдебранда и Хансена, модели UNIFAC [1, 2]. Проведен анализ относительных погрешностей расчета. Лучшей предсказательной способностью обладает расчет через параметр растворимости Хансена.

**Литература**

1. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии, Москва: Мир, 1989. Т. 2. 360 с.

2. Hansen C. M. The three-dimensional solubility parameter—key to paint component affinities // J. Paint Technol. 1967. Vol. 39. P. 104.