

В данной работе изотермическая сжимаемость рассчитывалась по стандартному термодинамическому соотношению через длинноволновой предел структурного фактора типа плотность-плотность.

Результаты моделирования показывают, что в рамках описания бинарных расплавленных смесей посредством модели жёстких ионов удаётся воспроизвести наблюдаемые в эксперименте закономерности изменения изотермической сжимаемости в зависимости от концентрации. А именно, увеличение положительных отклонений изотермической сжимаемости от аддитивности при замене аниона второго компонента в ряду Br – Cl – F.

Анализ структурных характеристик смесей в зависимости от концентрации компонентов демонстрирует, что в системе KF-KI при добавлении фторид-иона существенно меняется локальное окружение катиона калия. В объёме бинарной расплавленной смеси KF-KI формируются области преимущественно содержащие катион-анионные группировки, соответствующие индивидуальным компонентам. В противоположность этому в бинарных смесях KBr-KI и KCl-KI наблюдается закономерное изменение состава ближайшего катион-анионного окружения при добавлении второго компонента.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАНСУЛЬФОНАТОВ НАТРИЯ И КАЛИЯ

Сулимов А.В.,* Косова Д.А., Дружинина А.И., Тифлова Л.А.

МГУ, Москва, Россия

*sulimov.art@gmail.com

Изучение свойств солей метансульфоновой кислоты и систем на их основе представляет интерес, в первую очередь, с точки зрения фундаментальных исследований, так как информация о свойствах этих солей в литературе представлена фрагментарно, несмотря на то, что метансульфоновая кислота и ее неорганические производные находят применение в различных областях. С практической точки зрения исследование свойств метансульфонатов натрия и калия интересно для решения задач геохимии. Метансульфоновая кислота является продуктом окисления диметилсульфида кислородом воздуха, который, в свою очередь, представляет собой продукт жизнедеятельности фитопланктона. Не так давно были обнаружены метансульфонаты натрия и калия в кернах льда Антарктики. Знание свойств и состава ледяных кернов может быть применено для воссоздания климатических изменений и состава мирового океана в течение формирования породы, то есть для решения задач геотермобарометрии. Целью настоящей работы стало изучение термодинамических свойств солей метансульфоновой кислоты — $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{ONa}$ и $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{OK}$.

В ходе работы было проведено измерение изобарных теплоемкостей солей методом ДСК в широком интервале температур. Методом калориметрии растворения определен тепловой эффект растворения солей в воде при 298,15 К. На основании экспериментальных данных рассчитаны температурные зависимости термодинамических функций солей в программе CpFit (<http://td.chem.msu.ru/develop/cpfit/>) - изобарная теплоемкость, энтропия, энтальпия. При аппроксимации использовалась линейная комбинация функций Эйнштейна-Планка. Из данных калориметрии растворения рассчитаны стандартные энтальпии образования солей при 298,15 К.

-
1. Gernon M. D., Wu M. Buzsta, T. Janney. *Environmental Benefits of Methanesulfonic Acid. Comparative Properties and Advantages*. Green Chemistry, 1999, 1.
 2. Baker S. C., Kelly D. P., Murrell J. C. *Microbial Degradation of Methanesulphonic Acid: A Missing Link in the Biogeochemical Sulphur Cycle*. Nature, 1991, 350.