

Спектральному анализу подвергались также и сухие остатки восков, полученные при фильтрации растворов восков, параллельно определялась их энтальпия плавления. Спектрограммы осадков представляли собой картину абсолютно идентичную спектрограммам мицеллярных растворов, т.е. содержали характеристические полосы, свидетельствующие о наличии тех же функциональных групп, что и у мицелл. Анализ полученных результатов показал следующее: энтальпии сухих восков, прошедших обработку четыреххлористым углеродом, оказались выше. Видимо, это объясняется наличием примесей в сырых восках, на что показывают и сдвинутые точки плавления.

Расшифровка спектрограмм показала сложную корреляционную зависимость энтальпии плавления и перечисленных функциональных групп.

Из полученных результатов можно сделать следующие выводы.

Энтальпия плавления тем больше, чем больше свободных гидроксильных групп содержат молекулы воска. В такой же зависимости находится энтальпия плавления и содержание групп карбоксила карбоновых кислот, сложноэфирных группировок и третичных радикалов. Это объясняется тем, что третичные радикалы и насыщенные сложноэфирные группировки, имея разветвленный скелет, образуют сильные внутримолекулярные и межмолекулярные связи, для разрушения которых необходима большая энергия, чем при разрушении связей в молекулах с линейным углеродородным скелетом. Отсюда - большая скрытая внутренняя энергия молекулы. Следовательно, один из путей модифицирования природных олигомеров - введение в молекулу третичных радикалов, карбоксила, что повысит энергосодержание молекулы.

### **ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ АЦЕТАТА НАТРИЯ**

Долесов А.Г., Хрисониди В.А.

*Кубанский государственный технологический  
университет  
Краснодар, Россия*

Аккумуляции тепла в настоящее время уделяют большое внимание. Оно широко применяется для аккумуляции солнечной энергии, создания комфортных условий в жилых и производственных помещениях. Применение тепловых аккумуляторов способствует сглаживанию суточных и сезонных пи-

ков потребления электроэнергии, снижению расхода энергетических ресурсов.

Аккумуляция тепла (АТ) осуществляется, как правило, за счет теплоты фазового перехода при температуре плавления или кристаллизации индивидуальных веществ или их смесей.

Для рекомендации веществ в качестве АТ необходимо, чтобы они удовлетворяли следующим требованиям: имели необходимую температуру плавления; высокую удельную теплоту фазового перехода; незначительную величину переохлаждения при кристаллизации, незначительную токсичность, взрывобезопасность, доступность и низкую стоимость, сохраняли стабильность свойств при многократных циклах плавления и кристаллизации.

Анализ научно-технической литературы показал, что в качестве АТ перспективными веществами являются многие водно-солевые системы.

Однако, отсутствие важных физико-химических характеристик для многих систем исключает возможность использования их в качестве теплового аккумулятора без проведения специальных исследований.

Из справочной литературы следует, что тригидрат ацетата натрия имеет температуру плавления 58 °С, теплоту плавления - 220 кДж/кг, теплоемкость твердой фазы - 2,0 кДж/(кг.К), жидкой - 2,8 кДж/(кг.К), то есть это вещество по своим свойствам является перспективным АТ.

Для рекомендации этого вещества в качестве АТ, необходимы дополнительные исследования, с целью определения всех необходимых характеристик, предъявляемым к теплоаккумуляторным материалам.

Наши исследования методом дифференциально-термического анализа (ДТА) показали, что тригидрат ацетата натрия плавится изотермично при температуре (58±0,2) °С, при охлаждении сильно переохлаждается (на 30-40 °С), в отдельных случаях не кристаллизуется даже при температуре ниже минус 50 °С и переходит в стеклообразное состояние.

Кристаллизацию тригидрата ацетата натрия, как известно, можно инициировать введением готовых кристаллов данного вещества при температуре ниже 58 °С или механическим перемешиванием. Однако, в этом случае, это вещество в качестве АТ можно использовать только в тех устройствах, где возможно такой метод снижения переохлаждения.

Хотя, вопросу снижения переохлаждения веществ посвящен ряд теоретических и экспериментальных работ, но до конца этот вопрос остается нерешенным. Поэтому на

практике для каждого вещества этот вопрос решают эмпирическим методом.

В связи с этим, нами были проведены исследования и найдены эффективные инициаторы кристаллизации для тригидрата ацетата натрия, которые снижают величину переохлаждения до величины не более 5 °С. Записи кривых нагрева и охлаждения показали, что стабильность температуры плавления и кристаллизации при многократном цикле не нарушается, однако величина переохлаждения при этом изменяется. Это связано с тем, что при многократных циклах фазового перехода, из-за различной плотности веществ происходит частичное расслоение компонентов. Кроме того, при нагревании до 80-95 °С из-за частичного испарения кристаллизационной воды нарушается стабильность температуры плавления и кристаллизации.

В результате исследований было установлено, что если в тригидрат ацетата натрия с инициаторами кристаллизации вводить загуститель, то можно исключить расслоение и испарение кристаллизационной воды. Из всех испытанных загустителей эффективным оказался карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ). По данным разработкам были получены патенты.

На основании этих исследований нами разработан теплоаккумулирующий материал (ТАМ) на основе тригидрата ацетата натрия. Кроме того, нами были проведены исследования на коррозионную стойкость конструктивных материалов к ТАМ. В результате было установлено, что этот материал коррозионно неактивен к меди, стали углеродистой, алюминий Д16 и других марок. Скорость коррозии для этих материалов не превышает 0,02 мм/год.

Эффективность использования данного материала проверена на тепловозах. Во время отстоя тепловоза в зимнее время двигатель оставляют включенным, чтобы избежать остывания двигателя. При этом расходуется значительное количество топлива. Использование данного материала в тепловозах позволяет поддерживать необходимую температуру двигателя после его выключения и при этом происходит значительная экономия топлива. Данный материал можно использовать и в других термостабилизирующих устройствах, а также для обогрева жилых помещений и полов, для создания комфортных жилетов монтажникам и другим работникам, работающим в экстремальных и аварийных условиях в зимнее время.

### Фундаментальные исследования

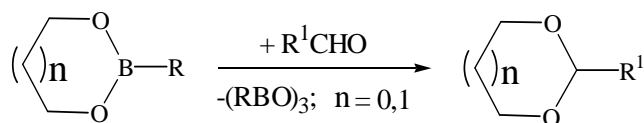
#### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ФОРМАЛЬДЕГИДА С 2-МЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНОМ

Брусиловский Ю.Э.<sup>1</sup>, Кузнецов В.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН

Известно, что взаимодействие 1,3-диокса-2-борациклоалканов с альдегидами приводит к соответствующим 1,3-диоксациклоалканам [1-4].



Настоящая работа посвящена моделированию механизма взаимодействия 2-метил-1,3,2-диоксаборинана (I) с формальдегидом с помощью полуэмпирического квантово-химического приближения PM3 в рамках про-

граммного обеспечения HyperChem [5]. Исследуемую реакцию можно рассматривать как цепь последовательных элементарных стадий, начиная от исходного эфира I и до конечного 1,3-диоксана III.