

Hemijsko inženjerstvo / Chemical Engineering

HI O 1

[text rada / full text](#)**Eksperimentalna merenja i teorijske simulacije binarnih sistema alkohola i ugljovodonika**

Milana M. Zarić, Petra Imhof*, Ivona R. Radović**, Mirjana Lj. Kijevčanin**
 IHTM - Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Srbija
 *Odsek za fiziku, Freie Universitat Berlin, Nemačka
 **Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija

Eksperimentalne i teorijske metode korišćene su za proučavanje dve smeše, 1-heksanola sa n-heksanom i cis-3-heksen-1-ola sa n-heksanom. Eksperimentalne tehnike su korišćene za određivanje dopunskih zapremina i promene viskoznosti za temperaturni opseg od 288.15K do 318.15K. Podaci o dopunskoj molarnoj zapremini ukazuje na slično ponašanje dva alkohola, 1-heksanola i cis-3-heksen-1-ola u smešama sa n-heksanom. Eksperimentalni podaci su u skladu sa simulacijom molekularne dinamike ovih smeša, pokazujući sličan broj vodoničnih veza u dve smeše. Eksperimentalni podaci o promeni viskoznosti pokazuju značajnu razliku između dve smeše, odstupanje je značajno veće za smešu cis-3-heksen-1-ol i n-heksan, što ukazuje na jaču interakciju u binarnoj smeši cis-3-heksen-1-ola i nheksana. Ovi eksperimentalni podaci su u skladu sa kvantno-hemijskim proračunima energija interakcija na molekulskom nivou. Naime, izračunate energije interakcije pokazuju da je interakcija između jednostrukih i dvostrukih veza jača, nego interakcija između dve jednostruke veze.

Experimental measurements and theoretical simulations of alcohol and hydrocarbon binary systems

Milana M. Zarić, Petra Imhof*, Ivona R. Radović**, Mirjana Lj. Kijevčanin**
 ICTM – Scientific Institution Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia
 *Department of Physics, Freie Universität Berlin, Germany
 **Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia

Experimental and theoretical methods were used to study two mixtures, 1-hexanol with n-hexane and cis-3-hexen-1-ol with n-hexane. The experimental technics were used to determine excess molar volume and viscosity deviations in the temperature range from 288.15K to 318.15K. The data of excess molar volume indicate similar behavior of the two alcohols, 1-hexanol and cis-3-hexen-1-ol in mixtures with n-hexane. The experimental data are in accordance with molecular dynamics simulation of these mixtures, showing similar number of hydrogen bonds in the two mixtures. The experimental data of viscosity deviations show difference of the two mixtures, where the deviation is significantly larger for cis-3-hexen-1-ol and n-hexane mixture, indicating stronger interactions within cis-3-hexen-1-ol and n-hexane binary mixture. These experimental data are in accordance with quantum chemical calculations on interactions energies. Namely, calculated interaction energies show that interaction between single and double bonds are stronger, than interactions between two single bonds.