

С. І. Герасимчук, І. П. Полюжин, Г. В. Мельник, Ю. П. Павловський, В. В. Сергєєв
Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра фізичної, аналітичної та загальної хімії
Sergii.I.Gerasymchuk@lpnu.ua

ФАЗОВА РІВНОВАГА ПАРА–РІДИНА РОЗЧИНІВ ДІЕТИЛСЕЛЕНУ ТА ДІЕТИЛЦИНКУ

<https://doi.org/10.23939/ctas2021.02.010>

За допомогою напівемпіричної моделі Вільсона описана рівновага пара–рідина в системі діетилцинк–діетилселен: розраховано коефіцієнти активності компонентів розчину, коефіцієнт розділення, надлишкові функції розчину (H^E , G^E , TS^E) та побудовано ізотермічні P-X діаграми стану. Параметри моделі Вільсона розраховано на основі отриманих даних з вимірювання температурної залежності тиску насиченої пари високочистих зразків діетилцинку, діетилселену та їх еквімолекулярного розчину за допомогою методу ітерацій математичного пакета програм Mathcad 14. Встановлено особливості міжмолекулярної взаємодії в системі «діетилцинк–діетилселен» та наявність від’ємного відхилення від закону Рауля. Досліджена система є гомогенною у всьому концентраційному діапазоні. Концентраційна залежність ентальпії змішування є знакозмінною для дослідженого температурного діапазону (280–340 К).

Ключові слова: діетилцинк, діетилселен; модель Вільсона; азеотроп; тиск насиченої пари; коефіцієнти активності; надлишкові функції змішування.

Вступ

В оглядовій роботі [1] вказано, що органічні сполуки селену знайшли застосування як в органічному синтезі, так і в біохімії, ксерографії, для отримання напівпровідникових матеріалів та комплексних сполук. Органічні сполуки цинку, зокрема диметилцинк та діетилцинк, використовують [2] як реагенти в органічному синтезі (енантіоселективне алкілювання карбонілів та імінів), для виробництва напівпровідникових плівок (ZnS, ZnSe, ZnTe) за технологією MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition), отримання наноструктур оксиду цинку, а також як прекурсори в технології напівпровідників III–V груп (GaAs, InP, $Al_xGa_{1-x}As$). У роботі [2] представлено результати комбінованого кристалографічного та розрахункового дослідження, які показують, що кристалічні структури Me_2Zn та Et_2Zn утримуються переважно силами Ван дер Ваальса з відповідним балансом перекирвання електронних хмар. Дослідженню довжини, сили і полярності зв’язків «метал–вуглець» у сполуках діалкілцинку методами газової електронної дифракції та фотоелектронної спектроскопії присвячена робота [3].

Дослідження алкільних похідних селену також продовжуються. Зокрема в роботі [4] розроблено метод хроматографічного визначення з допомогою LC-ICP-MS диметилселеніду та диметилдиселеніду в пробах, які були взяті з клітин. Встановлено [5], що диметилселенід разом з органічними сполуками сірки може спричинювати неприємний смак бутильованих мінеральних вод і розроблено GC-MS методику для визначення цих сполук. Важливість органічних сполук селену для довілля спонукала дослідити [5] температурну (277,2–313,2 К) залежність коефіцієнта Генрі для диметилселеніду у процесі рівноважного розподілу цієї сполуки між повітрям та водою і на основі результатів експерименту зробити висновок, що за зростання температури буде підвищуватися дифузія диметилселеніду з ґрунту в повітря. Органоселенові сполуки є важливими в біохімії, що детально розглянуто в роботі [7]. Існує невелика кількість робіт з визначення температурної залежності тиску насиченої пари діетилселену [8] та діетилцинку [9,10], але дані в них суттєво відрізняються, крім того, відсутня характеристика взірців за чистотою.

Раніше в роботах [11, 12], коефіцієнти активності компонентів розчину, коефіцієнт розділення, надлишкові функції розчину (H^E , G^E , TS^E) розраховано та побудовано ізотермічні P-X діаграми стану систем диметилселен-диметилцинк та диметилтелур-диметилкадмій за результатами вимірювання температурної залежності тиску насиченої пари в інтервалі 280–340 К. За результатами розрахунків зроблено висновки: про існування азеотропу; про від'ємне відхилення від закону Рауля; про гомогенність розчинів даних систем у всьому інтервалі концентрацій та температур (280–340 К).

Робота є продовженням цієї серії робіт. Метою роботи є дослідження рівноваги пара-рідина в системі діетилцинк-діетилселен, зокрема розрахунок коефіцієнтів активності компонентів розчину, коефіцієнту розділення, надлишкових функцій розчину (H^E , G^E , TS^E) та побудова ізотермічних P-X діаграм стану, а також виявлення впливу заміни алкільного радикалу (метильного на етильний) на властивості розчинів елементарноорганічних сполук.

Матеріали та методи досліджень

Характеристика високочистих експериментальних проб речовин та методика тензіметричного експерименту, за якою було отримано температурні залежності тиску насиченої пари діетилселен-діетилцинк була такою, як це детально описано в роботах [13,14].

Методика тензіметричного експерименту не дозволяє разом з загальним тиском насиченої пари для діетилселену, діетилцинку та їх екімолекулярного розчину визначити склад рівноважних фаз. Оскільки дані речовини є токсичними, високоактивними та мають високу леткість, тому доволі складною проблемою є побудова ізотермічних P-X діаграм стану за тензіметричними даними. Напівемпірична модель Вільсона (Wilson) [15] дає можливість вирішити цю проблему, використовуючи дані для температурної залежності тиску насиченої пари індивідуальних компонентів та розчину азеотропного складу, мольна частка якого становить $x_1 = 0,5$ для системи «діетилселен-діетилцинк». Ці температурні залежності ми отримали в межах 273–352 К (табл. 1) в роботі [14].

Таблиця 1

Статистична обробка первинних даних для температурної залежності тиску насиченої пари діетилцинку, діетилселену та їх екімолекулярного розчину [14]

Система	Коефіцієнти рівняння $\ln p = A/T + B$		S_A	$S_B \cdot 10^2$	R^2
	-A	B			
Se (C ₂ H ₅) ₂	4468	23,213	27	8,8	0,998
Zn (C ₂ H ₅) ₂	4574	23,246	17	5,6	0,962
Se (C ₂ H ₅) ₂ Zn (C ₂ H ₅) ₂	4490	22,748	27	7,5	0,978

У табл. 1 використано такі позначення: S_A , S_B – вибіркове середньоквадратичне відхилення коефіцієнтів A, B; R^2 – квадрат коефіцієнта кореляції. Детальніше обґрунтування вибору моделі Вільсона, за таких умов, представлено в роботі [11], де ми описали паро-рідинну рівновагу системи «диметилцинк-диметилселен».

Результати та обговорення

У рівняннях Вільсона стосовно бінарної системи для розрахунку коефіцієнтів Λ_{ij} ми використали такі дані: тиск насиченої пари

азеотропу (p^{as}), тиски насиченої пари індивідуальних діетилселену, діетилцинку (p_1^0 , p_2^0) та дані про склад азеотропу ($x_1 = x_2 = 0.5$). Прийнято такі індекси для позначення речовин: «1» – діетилселен – $T_{кип.} = 381,2$ К [16]; «2» – діетилцинк – $T_{кип.} = 391,2$ К [17]. Значення тисків індивідуальних компонентів та екімолекулярного розчину були розраховані з відповідних температурних залежностей тиску насиченої пари, параметри яких подано в табл. 1.

Для температур 280, 300, 320 та 340 К, які входять у діапазон первинних експериментальних

даних проводились усі такі термодинамічні розрахунки [14]. Якщо вважати газову фазу ідеальною, то для азеотропної суміші вмісту $x_1 = 0.5$, отримаємо вираз (1) для коефіцієнтів активності в азеотропі:

$$\gamma_i^{as} = \frac{p_i^{as}}{p_i^0} \quad (1)$$

Результати розрахунків тиску пари індивідуальних діетилселену та діетилцинку (p_1^0, p_2^0), тиску насиченої пари азеотропу (p^{as}) та коефіцієнтів активності компонентів в азеотропі ($\gamma_1^{as}, \gamma_2^{as}$) за різної температури наведені в табл. 2.

Таблиця 2

Тиск насиченої пари діетилселену (p_1^0), діетилцинку (p_2^0), еквімолекулярного азеотропу (p^{as}) та коефіцієнти активності компонентів в азеотропі ($\gamma_1^{as}, \gamma_2^{as}$)

T, К	p_1^0 , кПа	p_2^0 , кПа	p^{as} , кПа	γ_1^{as}	γ_2^{as}
280	1,416	1,003	0,823	0,5812	0,8205
300	4,104	2,979	2,395	0,5836	0,8040
320	10,410	7,726	6,105	0,5865	0,7902
340	23,671	17,910	13,934	0,5887	0,7780

Рівняння Вільсона для двокомпонентної системи з урахуванням, що в точці азеотропу $x_1 = x_2 = 0,5$ і $\gamma_i = \gamma_i^{as}$ матимуть вигляд (2) та (3).

$$\ln(0.5\gamma_i^{as}) = -\ln(I + \Lambda_{12}) + \left[\frac{\Lambda_{12}}{I + \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21} + I} \right] \quad (2)$$

$$\ln(0.5\gamma_2^{as}) = -\ln(I + \Lambda_{21}) - \left[\frac{\Lambda_{12}}{I + \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21} + I} \right] \quad (3)$$

Параметри Λ_{12} і Λ_{21} в рівняннях (2) і (3) було знайдено з використанням пакета Mathcad 14 методом ітерацій на основі блоку Given-Find [18]. Результати розрахунку коефіцієнтів Λ_{12} і Λ_{21} за різної температури подано в табл. 3.

Таблиця 3

Коефіцієнти моделі Вільсона для розчинів діетилселен-діетилцинк за різної температури

Λ_{ij}	T = 280 К	T = 300 К	T = 320 К	T = 340 К
Λ_{12}	4,679	4,218	3,925	3,715
Λ_{21}	0,477	0,634	0,753	0,852

Залежності від молярної частки діетилселену в розчині для: коефіцієнтів активності (γ_1, γ_2), що показано на рис. 1, а також для парціальних тисків компонентів (p_1, p_2) – рис. 2, складу парової фази (Y_1) – рис. 3. можна визначити за параметрами рівняння Вільсона (Λ_{12} і Λ_{21}). Здійснено порівняння коефіцієнтів активності (γ_1, γ_2) з цими величинами для метильних похідних цинку та селену з роботи [11], що показано на рис. 1. Видно (рис. 1(А та Б)), що за однакового вмісту R_2Se в розчині коефіцієнти активності для етильних сполук селену та цинку є більшими, ніж для відповідних метильних похідних.

За залежністю загального тиску пари системи «діетилселен-діетилцинк» від складу розчину (рис. 2) можна зробити висновок про від'ємне відхилення від закону Рауля, що є аналогічним до системи метильних похідних селену та цинку за даними роботи [11].

Залежності складу парової фази (Y_1) від вмісту діетилселену (x_1) в бінарному розчині діетилселену та діетилцинку (рис. 3) практично не залежать від температури, що також спостерігалось для випаровування метильних похідних селену та цинку [11], тому ця залежність наведена тільки для двох крайніх температур дослідженого діапазону 280 та 340 К.

На рис. 4 показано ізотермічні P - X діаграми стану, які можна використати для визначення теоретичних тарілок розділення в технологічних розрахунках процесу перегонки сумішей діетилселену та діетилцинку. За рівнянням (4) розраховано коефіцієнт розділення (α), логарифми якого подано в табл. 4 залежно від складу розчину (x_1) та температури.

$$\alpha = \frac{x_2 Y_1}{x_1 Y_2} \quad (4)$$

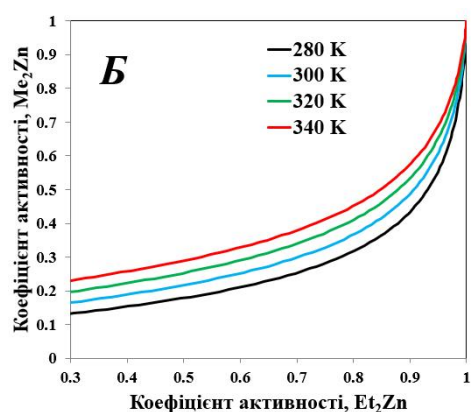
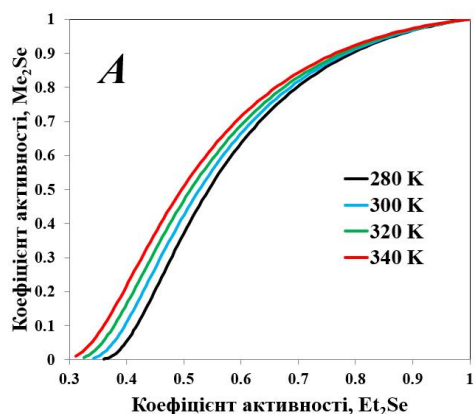


Рис. 1. Порівняння коефіцієнтів активності (γ_1, γ_2) для метильних похідних цинку та селену з роботи [11] та етильних похідних цинку та селену за різної температури: А – R_2Se ; Б – R_2Zn .

Також розраховано надлишкові функції розчину: ентальпія (H^E), енергія Гіббса (G^E) та «зв'язана енергія» (TS^E). Використовуючи експериментальні дані тензиметрії, модель Вільсона дає змогу досить просто розрахувати надлишкову теплоту змішування для бінарного розчину за рівнянням (5).

$$H^E = x_1 \frac{x_2 \Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} x_2} (\lambda_{12} - \lambda_{11}) + x_2 \frac{x_1 \Lambda_{21}}{x_2 + \Lambda_{21} x_1} (\lambda_{12} - \lambda_{22}) \quad (5)$$

Величини $(\lambda_{12} - \lambda_{11})$ та $(\lambda_{12} - \lambda_{22})$ в рівнянні (5), які характеризують різницю енергій взаємодії молекул між парою ij та парою ii , можна вважати сталими за незначної зміни температури [15] і отримати їх за рівнянням (6), яке описується прямою лінією в логарифмічних координатах:

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j^L}{V_i^L} \exp \left[- \frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ii}}{RT} \right] \quad (6)$$

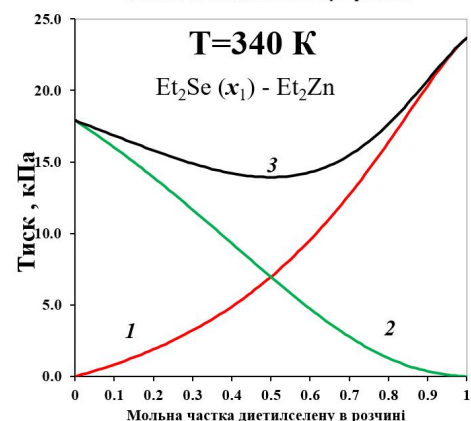
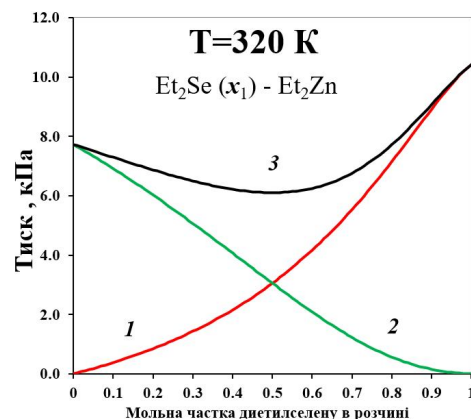
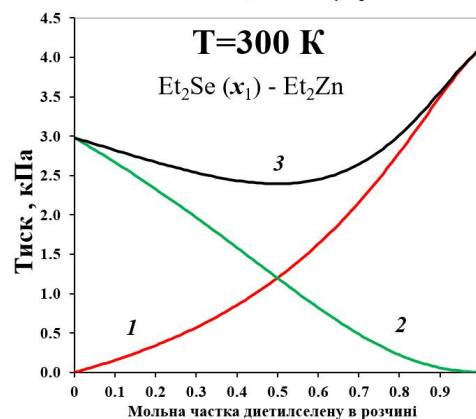
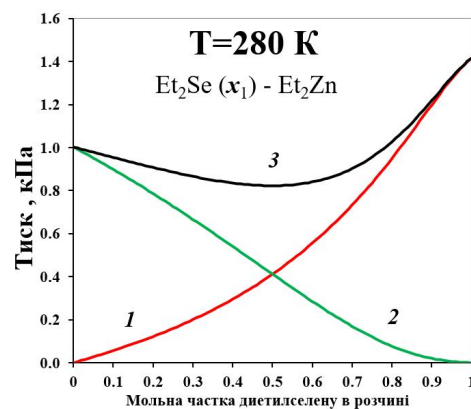


Рис. 2. Залежності парціальних тисків компонентів (p_1, p_2) від вмісту діетилселену (x_1) в бінарному розчині $Se(C_2H_5)_2$ і $Zn(C_2H_5)_2$ за різної температури: 1- $Se(C_2H_5)_2$; 2- $Zn(C_2H_5)_2$; 3-загальний тиск

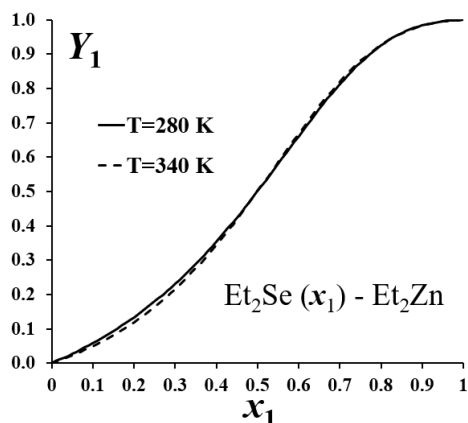


Рис. 3. Залежності складу парової фази (Y_1) від вмісту діетилселену (x_1) в бінарному розчині діетилселену і діетилцинку за різної температури

Для розрахунків згідно з рівнянням (6) використовують величини Λ_{ij} з табл. 3.

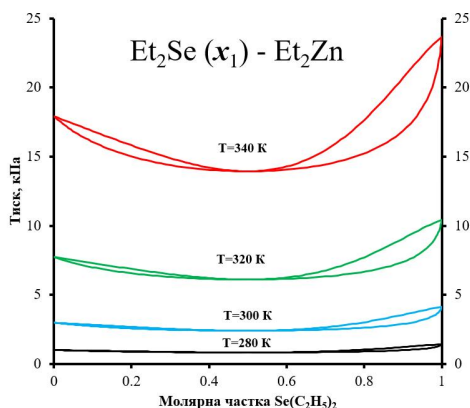


Рис. 4. Ізотермічні діаграми стану паро-рідинної рівноваги системи діетилселен-діетилцинк

Таблиця 4

Коефіцієнти розділення діетилселену та діетилцинку в бінарному розчині за різної температури

x_1	$\ln(\alpha)$			
	280 К	300 К	320 К	340 К
0,1	-0,588	-0,652	-0,708	-0,758
0,2	-0,484	-0,533	-0,575	-0,612
0,3	-0,357	-0,391	-0,418	-0,442
0,4	-0,200	-0,217	-0,230	-0,241
0,5	0	0	0	0
0,6	0,261	0,277	0,288	0,297
0,7	0,617	0,642	0,659	0,671
0,8	1,127	1,147	1,155	1,160
0,9	1,915	1,887	1,859	1,835

Результати статистичного опрацювання даних температурної залежності коефіцієнтів Λ_{12}

і Λ_{21} , апроксимованих рівняннями прямих ліній та розрахунки $(\lambda_{12} - \lambda_{11})$ і $(\lambda_{12} - \lambda_{22})$ наведено в табл. 5 для температурного діапазону 280–340 К.

За рівняннями (7) і (8) розраховали надлишкову енергію Гіббса (G^E) та надлишкову «зв'язану енергію» розчину (TS^E):

$$G^E = RT(x_1 \ln(\gamma_1) + x_2 \ln(\gamma_2)) \quad (7)$$

$$TS^E = H^E - G^E \quad (8)$$

Результати розрахунків надлишкових функцій H^E , G^E та TS^E наведено на рис. 5 та 6.

Для діетильних похідних цинку та селену залежність надлишкової ентальпії змішування має знакозмінний характер на відміну від результатів роботи [11], де описано диметильні похідні. Цей факт можна пояснити різною довжиною алкільних радикалів, оскільки природа гетероатомів, які входять до складу сполук, що утворюють досліджену систему є однаковою. За електронегативністю *Se*, ймовірно, проявляє певні електронакцепторні властивості, стягуючи на себе електронну хмару молекули. Атом цинку має суттєво меншу електронегативність, тобто навпаки має електрондонорні властивості.

Таблиця 5

Температурна залежність параметрів Λ_{12} і Λ_{21} моделі Вільсона для системи «діетилселен-діетилцинк»

$\ln\Lambda_{12} = A/T + B$				
A	B	S_A	S_B	R^2
365,8	0,2293	22,2	0,072	0.993
$(\lambda_{12} - \lambda_{11}) = -3042 \pm 793 \text{ Дж/моль}$				
$\ln\Lambda_{21} = A/T + B$				
A	B	S_A	S_B	R^2
-917,9	2,5665	86,1	0,280	0.983
$(\lambda_{12} - \lambda_{22}) = 7632 \pm 3078 \text{ Дж/моль}$				

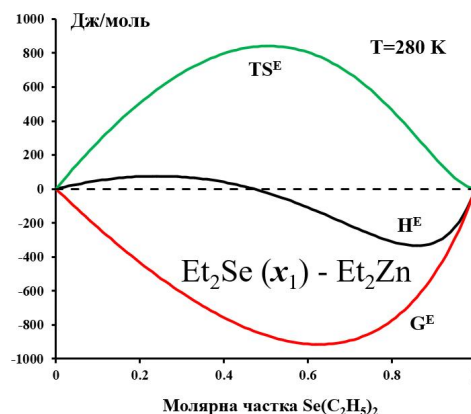


Рис. 5. Зіставлення залежностей надлишкових функцій від вмісту діетилселену (x_1) за температури 280 К у бінарному розчині $\text{Se}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$ і $\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$

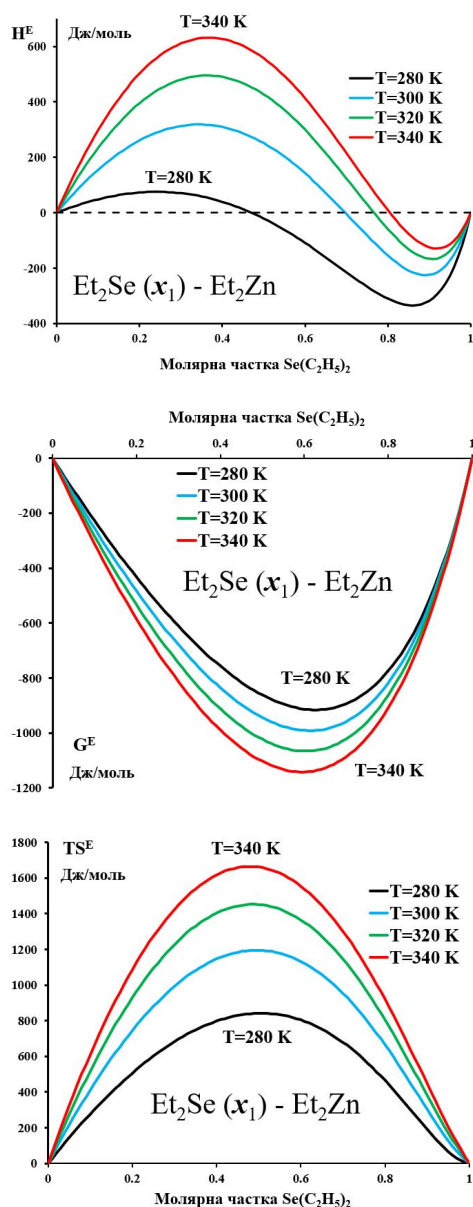


Рис. 6. Залежності надлишкових функцій від вмісту діетилселену (x_1) за різної температури в бінарному розчині $Se(C_2H_5)_2$ і $Zn(C_2H_5)_2$

Лінійні молекули з такою схемою $\delta^-Me-Zn^{2\delta+}-Me^{\delta-}$ та $\delta^+Me-Se^{2\delta-}-Me^{\delta+}$ розподілу часткових зарядів у полярних ковалентних зв'язках будуть притягатися між собою узгоджено і з силою більшою, ніж за аналогічних взаємодій молекул етильних похідних, де крайні CH_3 групи, для яких практично не має зсуву електронної густини з утворенням часткового заряду, створюють певні стеричні завади, що збільшує відстань між центрами цих молекул, які мають часткові заряди. Це, як наслідок, зменшує силу взаємодії між молекулами етильних похідних. Таким чином, за концентрації діетилселену вищій ніж

0,5 ентальпія змішування набуває значень менших за нуль, тобто енергія взаємодії між різнорідними молекулами перевищує енергію взаємодії між однорідними. У разі його концентрацій більших за 0,5 ентальпія змішування приймає додатні значення. За концентрацій близьких до 0,5 надлишкова ентальпія змішування приблизно дорівнює нулю, що свідчить про те, що за цієї концентрації енергія взаємодії різнорідних і однорідних молекул у розчині приблизно однакова.

Висновки

Розраховано термодинамічні параметри паро-рідинної рівноваги цієї системи: коефіцієнти активності компонентів, коефіцієнт розділення, надлишкові функції розчину та побудовані ізотермічні $P-X$ діаграми на основі експериментальних даних для температурної залежності тиску насиченої пари високочистих діетилселену, діетилцинку та їх еквімолекулярного розчину. На від'ємне відхилення від закону Рауля вказують коефіцієнти активності компонентів ($\gamma_i < 1$) та вигляд $P-X$ діаграм. Встановлено, що залежність надлишкової ентальпії змішування є знакозмінною. Це, на нашу думку, пояснюється зменшенням сил взаємодії часткових зарядів для різнорідних молекул за наявності стеричних перешкод від крайніх метильних груп. За концентрацій близьких до 0,5 надлишкова ентальпія змішування приблизно дорівнює нулю, що свідчить про те що за цієї концентрації енергія взаємодії різнорідних і однорідних молекул у розчині приблизно однакова. Підтвердженням утворення гомогенних розчинів є те, що значення надлишкових енергій Гіббса даного розчину (G^E) в усьому діапазоні концентрацій та температур є від'ємними.

References

1. Mukherjee A. J., Zade S. S., Singh H. B., Sunoj R. B. (2010). Organoselenium Chemistry: Role of Intramolecular Interactions. *Chemical Reviews*, 110(7), 4357-4416. doi:10.1021/cr900352j
2. Bacsa J., Hanke F., Hindley S., Odedra R., Darling G. R., Jones A. C., Steiner A. (2011). The Solid-State Structures of Dimethylzinc and Diethylzinc. *Angewandte Chemie International Edition*, 50(49), 11685-11687. doi:10.1002/anie.201105099

3. Haaland A., Green J. C., Mcgrady G. S., Downs A. J., Gullo E., Lyall M. J., . . . Østby, K. (2003). The length, strength and polarity of metal–carbon bonds: Dialkylzinc compounds studied by density functional theory calculations, gas electron diffraction and photoelectron spectroscopy. *Dalton Trans.*, (22), 4356-4366. doi:10.1039/b306840b
4. Lunøe K., Skov S., Gabel-Jensen C., Stürup S., Gammelgaard B. (2010). A method for analysis of dimethyl selenide and dimethyl diselenide by LC-ICP-DRC-MS. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 398(7-8), 3081-3086. doi:10.1007/s00216-010-4242-2
5. Guadayol M., Cortina M., Guadayol J. M., Caixach J. (2016). Determination of dimethyl selenide and dimethyl sulphide compounds causing off-flavours in bottled mineral waters. *Water Research*, 92, 149-155. doi:10.1016/j.watres.2016.01.016
6. Guo L., Jury W. A., Frankenberger W. T. (2000). Measurement of the Henrys Constant of Dimethyl Selenide as a Function of Temperature. *Journal of Environmental Quality*, 29(5), 1715-1717. doi:10.2134/jeq2000.00472425002900050044x
7. Karvekar M., Das A., Narajji C. (2007). Biological importance of organoselenium compounds. *Indian Journal of Pharmaceutical Sciences*, 69(3), 344. doi:10.4103/0250-474x.34541
8. Baev A. K. (1987). *Khimiia hazoheterohennyx sistem elementoorganicheskikh soedineniy*. Minsk: Nauka y tekhnika.
9. Thompson H. W., Linnett J. W. (1936). The vapour pressures and association of some metallic and non-metallic alkyls. *Transactions of the Faraday Society*, 32, 681-685. doi:10.1039/tf9363200681
10. Соколовский А. Е., Баев А. К. (1984) Термодинамическое изучение процесса испарения диметил- и диэтил цинка. *Журнал общей химии*, 54(1), 103–106.
11. Gerasymchuk S. I., Poliuzhyn I. P., Melnyk H. V., Pavlovskiy Y. P., Sergeev V. V. (2019). Phase Vapor–Liquid Equilibrium for the Solutions of Dimethylzinc and Dimethyl Selenide. *Chemistry, Technology and Application of Substances*, 2(2), 1–6. doi: 10.23939/ctas2019.02.001
12. Gerasymchuk S. I., Poliuzhyn I. P., Melnyk H. V., Pavlovskiy Yu. P., Sergeev V. V. (2020). Fazova rivnovaga para-ridyna rozchyniv dymetylcynku ta dymetylselenu. *Ximiia, tekhnologiiia rehovyn ta ikh zastosuvannia*. 3(1), 1–8. doi: 10.23939/ctas2020.01.001
13. Gerasimchuk S. I., Pavlovskii Y. P., Van-Chin-Syan Y. Y. (2012). Thermodynamics of the evaporation of dimethylzinc, dimethylselenium, and their equimolecular solutions. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 86(10),1500-1506. doi:10.1134/s003602441210010x
14. Gerasimchuk S. I., Pavlovskii Y. P., Sobechko I. B., Van-Chin-Syan Y. Y. (2014). Thermodynamics of the vaporization of alkyl compounds of zinc, selenium, cadmium, tellurium, and their equimolecular solutions. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 88(3), 365-371. doi:10.1134/s0036024414030054
15. Poling B. E., Prausnitz J. M., OConnell J. P. (2001). *The properties of gases and liquids*. New York: McGraw-Hill
16. <https://www.sigmaaldrich.com/UA/en/product/ALDRICH/550434>
17. The Merck Index. 10th ed. Rahway, New Jersey: Merck Co., Inc., 1983., p. 455
18. Naryshkin D. G. (2016). *Khimicheskaiia termodinamika s Mathcad*. Moskva: RIOR: INFRA-M.

S. I. Gerasymchuk, I. P. Poliuzhyn, H. V. Melnyk, Yu. P. Pavlovskiy, V. V. Serheyev

Lviv Polytechnic National University,
Department of Physical, Analytical and General Chemistry

PHASE VAPOR–LIQUID EQUILIBRIUM FOR THE SOLUTIONS OF DIETHYL SELENIDE AND DIETHYLZINC

Using a semi-empirical Wilson’s model, the vapor-liquid equilibrium in the “diethylzinc – diethyl selenide” system is described: the activity coefficients of the solution components, the separation coefficient, the excess functions of the solution (H^E , G^E , TS^E) are calculated, and isothermal P-X diagrams are obtained. The parameters of the Wilson’s model were calculated on the basis of our data on measuring the temperature dependence for saturated vapor pressure of high-purity samples of diethylzinc, diethyl selenide and their equimolecular solution using iterations from the mathematical software package Mathsad 14. Peculiarities of intermolecular interaction in the “diethylzinc – diethyl selenide” system and the presence of a negative deviation from Raoul's law have been found. The studied system is homogeneous in the whole concentration range. The concentration dependence of the enthalpy of mixing is alternating for the researched temperature range (280-340 K).

Key words: diethylzinc, diethyl selenide; the Wilson’s model; azeotrope; saturated vapor pressure; activity coefficients; excess mixing functions.