

## ЛИСТИ В РЕДАКЦІЮ

УДК 538.95

**Чечко В.Є., Гоцульський В.Я.**

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

E-mail: [AstandPPWT@ukr.net](mailto:AstandPPWT@ukr.net)

### **До статті «Кластеризація водних розчинів етанолу. Якісний підхід» [Фізика аеродисперсних систем. 2022 р., Т. 60, сс. 71-78]**

*Корекція даних щодо густини чистих компонентів (води та етанолу) при температурах 45 °С і 50 °С, які були використані в статті "Кластеризація водних розчинів етанолу. Якісний підхід" (Фізика аеродисперсних систем, 2022, Т. 60, С. 71-78), дозволила отримати точнішу концентраційну та температурну поведінку контракції водних розчинів етанолу при цих температурах. Це підтвердило зменшення впливу водневих зв'язків на волюметричні властивості розчинів зі зростанням температури.*

**Ключові слова:** розчини, вода, етанол, кластери, особлива точка.

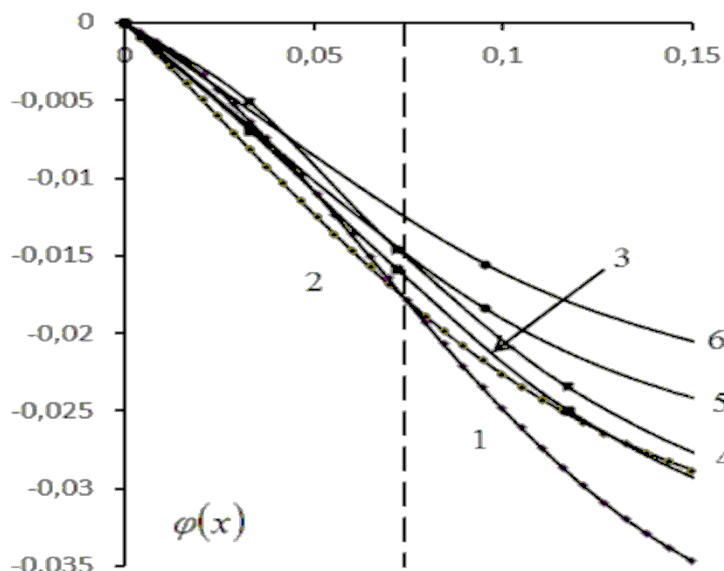
Стаття [1] присвячена якісному аналізу процесів кластеризації у водних розчинах етанолу. Кластеризація розчинів зумовлена виникненням водневих зв'язків між молекулами води та спирту (вода-спирт). Енергія цих зв'язків перевищує енергію зв'язків між молекулами чистих компонентів розчину (вода-вода і спирт-спирт). Згідно з роботою [2], при досягненні температури близько 42 °С і подальшому її підвищенні вплив водневих зв'язків на властивості води зменшується. У випадку розчинів це проявляється в тенденції до зростання надлишкового об'єму та контракції розчинів до нуля.

У [1] наведені результати розрахунків контракції водних розчинів етанолу. Дані щодо контракції за температур 0 °С і 40 °С отримані у [3] (див. рис. 1, залежності 1 і 2). Для розрахунків контракції розчинів за температур 45 °С та 50 °С були використані дані з [4]. Результати розрахунку контракції показали, що для концентраційної залежності характерно:

- при концентрації  $x_p=0.074$  (особлива точка розчину вода-етанол) величини контракції розташовані нижче за особливу точку [3];
- зі зростанням температури абсолютна величина контракції збільшується.

Ця поведінка контракції зі зростанням температури свідчить про подальше стиснення розчину порівняно з ідеальним розчином. Однак зі зростанням температури вплив водневих зв'язків зменшується через скорочення частки молекул, кінетична енергія яких є нижчою за енергію міжмолекулярної взаємодії вода-етанол. У результаті контракція розчину прагне до нуля.

Корекція даних густини води та етанолу для температур 45 °С і 50 °С на основі даних з [4], доповнена даними з [5], призвела до зменшення значень контракції. При концентрації  $x_p=0.074$  залежності розташовані вище за особливу точку. Проте спостерігається перетин цих залежностей на графіках, що відпові-



**Рис. 1.** Концентраційні залежності контракції водних розчинів етанолу для різних температур у інтервалі концентрацій  $0 \div 0.15$  мольних часток етанолу. Залежності 1 –  $0^\circ\text{C}$ , 2 –  $40^\circ\text{C}$  – отримано з [3]. Дані для розрахунку з відповідною корекцією густини чистих компонентів розчину: 3 –  $45^\circ\text{C}$  і 4 –  $50^\circ\text{C}$  [4], 5 –  $45^\circ\text{C}$  і 6 –  $50^\circ\text{C}$  [6]. Вертикальна штрихова лінія відповідає особливій точці розчину - 0.074 мольної частки етанолу.

дають нижчим температурам (див. залежності 3 і 4 на рис. 1). Можливо, причиною цього є похибки в експериментальних даних [4].

Для порівняння з цими даними були використані значення густини за тими самими температурами, отримані з роботи [6] (див. залежності 5 і 6 на рис. 1). На жаль, при концентраціях менших за 0.095 розрахунки не виконувалися через відсутність даних у цьому інтервалі. Однак навіть у цьому випадку можна зробити наступні висновки:

- при концентрації  $x_p$  концентраційні залежності контракції розташовані вище за особливу точку;
- зі зростанням температури абсолютна величина контракції зменшується;
- для концентрацій більших за  $x_p$  (праворуч від особливої точки) відсутні перетини залежностей контракції, що відповідають різним температурам.

Ця концентраційна та температурна поведінка контракції відповідає природі явища, що розглядається. Температурну поведінку контракції при концентраціях менших за  $x_p$  (ліворуч від особливої точки) можна пояснити так: зі зростанням температури частка мономерів чистих компонентів (вода-вода і спирт-спирт) зменшується, що призводить до зростання частки кластеризованого компоненту розчину, спричиняючи стиснення розчину порівняно з ідеальним розчином. Цей процес спостерігається до певної температури, розташованої в інтервалі від  $40^\circ\text{C}$  до  $45^\circ\text{C}$ . Подальше підвищення температури призводить до руйнування кластерів, що спричиняє зменшення контракції і перетин залежностей контракції для різних температур.

**Висновки.** При температурах вище  $40^\circ\text{C}$  ступінь кластеризації розчину зменшується через зниження впливу водневих зв'язків на об'ємні властивості

розчинів. Це проявляється в тому, що концентраційна залежність контракції за цих температур не перетинає особливу точку, а розташована вище за неї.

### Література:

1. Чечко В.Є., Гоцульський В.Я. Кластеризація водних розчинів етанолу // Якісний підхід // Фізика аеродисперсних систем. – 2022. – Т. 60. – Р. 71-78. <https://doi.org/10.18524/0367-1631.2022.60.267061>.
2. Булавин Л.А., Маломуж Н.П. Динамический фазовый переход в воде как важнейший фактор провоцирования денатурации белков в теплокровных организмах // Физика живого. – 2010. – Т. 18. – С. 16-22.
3. Chechko V.E., Gotsulsky V.Ya., Malomuzh M.P. Peculiar points in the phase diagram of the water-alcohol solutions // Condensed Matter Physics. – 2013. – V. 16(2). – P. 23006: 1–9. <https://doi.org/10.5488/CMP.16.23006>.
4. Khattab I.S., Bandarkar F., Fakhree M.A.A., Jouyban A. Density, viscosity, and surface tension of water+ethanol mixtures from 293 to 323K // Korean Journal of Chemical Engineering. – 2012. – V. 29. – P. 812–817. <https://doi.org/10.1007/s11814-011-0239-6>.
5. Alexandrov A.A., Trachtengerts M.S. Density of water at normal atmospheric pressure and temperatures from - 20 to 150 °C // Proceeding of 8 International conference on the properties of water and steam, September 23-27, 1974. – Ciens, France. – 1975. – V. 1. – P. 592-601.
6. Kabir M.H., Motin M.A., Huque M.E. Densities and excess molar volumes of Methanol, Ethanol and N-Propanol in pure Water and in Water + Surf Excel solutions at different temperatures // Physics and Chemistry of Liquids. – 2004. – V. 42(3). – P. 279–290. <https://doi.org/10.1080/0031910042000205346>.

*Chechko V.E., Gotsulskyi V.Ya.*

**To the article «Clustering of aqueous solutions of ethanol. Qualitative approach» [Physics of aerosol systems. 2022 p., Vol. 60, pp. 71-78]**

### SUMMARY

*Correction of the density data of pure components (water and ethanol) at temperatures of 45 °C and 50 °C, as utilized in the study titled "Clustering of Aqueous Solutions of Ethanol: A Qualitative Approach" [Physics of Aerosol Systems. 2022, Vol. 60, P. 71-78], facilitated obtaining accurate concentric and temperature-dependent behaviors of contraction in aqueous ethanol solutions at these temperatures. This validation confirmed the diminishing influence of hydrogen bonds on the volumetric properties of solutions as temperature increases.*

**Keywords:** solutions, water, ethanol, clusters, singular point.