

ЛИСТИ В РЕДАКЦІЮ

УДК 538.95

Чечко В.Є., Гоцульський В.Я.

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,

E-mail: AstandPPWT@ukr.net

До статті «Кластеризація водних розчинів етанолу. Якісний підхід» [Фізика аеродисперсних систем. 2022 р., Т. 60, с. 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 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-

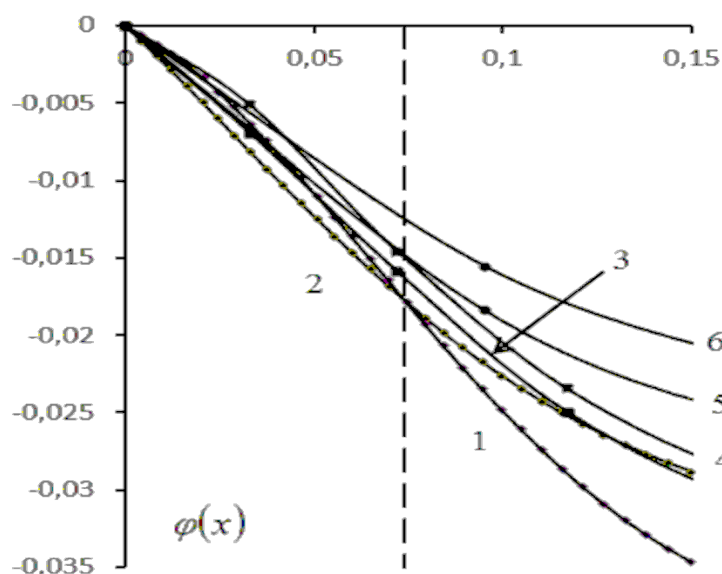


Рис. 1. Концентраційні залежності контракції водних розчинів етанолу для різних температур у інтервалі концентрацій $0 \div 0.15$ мольних часток етанолу. Залежності 1 – 0°C , 2 – 40°C – отримано з [3]. Дані для розрахунку з відповідною корекцією густини чистих компонентів розчину: 3 – 45°C і 4 – 50°C [4], 5 – 45°C і 6 – 50°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°C до 45°C . Подальше підвищення температури призводить до руйнування кластерів, що спричиняє зменшення контракції і перетин залежностей контракції для різних температур.

Висновки. При температурах вище 40°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, Vol. 60, p. 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.