



Ідентифікатор подання: 108

Тип: Секційна доповідь

Вплив температури на самодифузію молекул розчину вода-етанол малої концентрації

вівторок, 27 травня 2025 р. 11:35 (20 хвилин)

Раніше нами були проведені методом квазіпружного розсіяння повільних нейтронів дослідження динаміки молекул системи вода-етанол залежно від концентрації при температурі 281 К. Були визначені загальний коефіцієнт самодифузії молекул D , його одночастинкова DF і колективна DL складові та час осілого життя молекули у коливному стані t . Детально вивчена область малих концентрацій, де в околі концентрацій $X=0,04$ мольн.часток і $X=0,2$ мольн.част. у коефіцієнтах D та DF виявлено два мінімуми. Час t при цих концентраціях істотно зростає. Це вказує на значне зменшення при даних концентраціях інтенсивності активаційного механізму дифузії молекул.

Проте, аномальна поведінка характеристик дифузії залежить не тільки від концентрації, але і від температури розчину. У зв'язку з цим були проведені дослідження нейтронним методом динаміки молекул системи вода-етанол залежно від температури при постійній концентрації 0.04 мольн.част. в інтервалі $1.5^{\circ}\text{C} - 8^{\circ}\text{C}$. Саме при цій концентрації, як відзначалось вище, у даному розчині максимально сповільнені дифузійні рухи молекул. Як і в попередніх експериментах були визначені загальний коефіцієнт самодифузії молекул D , його одночастинкова DF і колективна DL складові та час осілого життя молекули у коливному стані t . Їх температурна залежність представлена, відповідно, на рисунках 1 і 2.

В околі температури 4 оС у коефіцієнтах D та DF виявлено глибокий мінімум. Час t при цій температурі істотно зростає (рис. 2). Отже, при даній температурі має місце суттєве сповільнення дифузійних процесів і саме активаційного механізму дифузії молекул розчину, що, цілком можливо, зумовлено зв'язуванням молекул води та етанолу у комплекси (кластери). Тобто в околі температури 4 С і концентрації 0,04 мольн.част. існує особлива точка, де відбувається інтенсивне утворення кластерів, які складаються з 1 або 2 молекул етанолу та 6 ± 10 молекул води. Конфігурація водневих зв'язків у середині елементарного кластера відрізняється від таких в об'ємі води. Час життя таких кластерів значно більший як часу зіткнень молекул, так і часу життя водних кластерів. Таким чином, даний елементарний кластер може розглядатися як псевдо частинка. Відхилення температури від 4С різко понижує інтенсивність утворення кластерів та руйнацію існуючих комплексів молекул води і етанолу. Необхідно відзначити, що у нашому випадку положення особливої точки не збігається з даними з розсіяння світла, згідно яким особлива точка знаходиться при 0,09 мольн. част.

Authors: Д-р. СЛІСЕНКО, Василь (ІЯД); Пан ВАСИЛЬКЕВИЧ, Олександр (ІЯД)

Доповідач: Пан ВАСИЛЬКЕВИЧ, Олександр (ІЯД)

Тип засідання: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство

Класифікація за напрямком: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство