

**О. А. Василькевич\*, В. І. Слісенко**

*Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна*

\*Відповідальний автор: a.vas@i.ua

## **НЕЙТРОННІ ДОСЛІДЖЕННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В ОКОЛІ ОСОБЛИВОЇ ТОЧКИ У РОЗБАВЛЕНОМУ ВОДНОМУ РОЗЧИНІ ЕТАНОЛУ**

Проблема, що розглядається у даній роботі, стосується фізики рідин. Точніше фізики динамічних процесів у рідинах. Методом квазіпружного розсіяння повільних нейтронів досліджено динаміку молекул системи вода - етанол залежно від концентрації за температури 8 °С і залежно від температури при концентрації  $X = 0,04$  мольних часток (мольн. част.). Визначено загальний коефіцієнт самодифузії молекул  $D$ , його одночастинкова  $D_{s-p}$  і колективна  $D_{coll}$  складові та час осілого життя молекули у коливному стані  $\tau$ . Детально вивчено область малих концентрацій, де в околі концентрацій  $X = 0,04$  мольн. част. і  $X = 0,2$  мольн. част. у коефіцієнтах  $D$  та  $D_{s-p}$  виявлено два мінімуми. Час  $\tau$  при цих концентраціях істотно зростає. Це вказує на значне зменшення при даних концентраціях інтенсивності активаційного механізму дифузії молекул, що, цілком можливо, зумовлено зв'язуванням молекул води та етанолу у комплекси (кластери). Аналогічно в околі температури 4 °С у коефіцієнтах  $D$  та  $D_{s-p}$  виявлено глибокий мінімум. Час  $\tau$  за цієї температури теж збільшується. Тобто, за температури 4 °С відбувається зниження інтенсивності активаційного механізму дифузії молекул розчину. Отже, при концентрації  $X = 0,04$  мольн. част. і температурі 4 °С у системі вода - етанол існує особлива точка. Проте, її положення не збігається з даними з розсіяння світла.

*Ключові слова:* квазіпружне розсіяння повільних нейтронів, коефіцієнт самодифузії, одночастинкова і колективна складові коефіцієнта самодифузії, кластер, етанол, розбавлені водно-спиртові розчини.

**O. A. Vasylykevych\*, V. I. Slisenko**

*Institute for Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

\*Corresponding author: a.vas@i.ua

## **NEUTRON STUDIES OF DIFFUSION PROCESSES NEAR A SINGULAR POINT IN A DILUTE AQUEOUS SOLUTION OF ETHANOL**

The problem considered in this work relates to the physics of liquids. Rather, to the physics of dynamic processes in liquids. The method of quasielastic scattering of slow neutrons was used to study the dynamics of molecules of the water-ethanol system as a function of concentration at a temperature of 8 °C and as a function of temperature at a concentration of  $X = 0.04$  molar particles (mol. particl.). The overall coefficient of self-diffusion of molecules  $D$ , its single-particle  $D_{s-p}$  and collective  $D_{coll}$  components, as well as the time of settled life of a molecule in a vibrational state  $\tau$ , are determined. The region of small concentrations was studied in detail, where in the vicinity of concentrations  $X = 0.04$  mol. particl. and  $X = 0.2$  mol. particl. two minima are found in the coefficients  $D$  and  $D_{s-p}$ . Time  $\tau$  at these concentrations increases significantly. This indicates a significant decrease in the intensity of the activation mechanism of molecular diffusion at these concentrations, which is quite possibly caused by the binding of water and ethanol molecules into complexes (clusters). Similarly, a deep minimum was found in the  $D$  and  $D_{s-p}$  coefficients near the temperature of 4 °C. Time  $\tau$  at this temperature also increases. That is, at a temperature of 4 °C, the intensity of the activation mechanism of the diffusion of solution molecules decreases. Therefore, at a concentration of  $X = 0.04$  mol. particl. and at a temperature of 4 °C, a special point exists in the water-ethanol system. However, its position does not coincide with the data on scattering light.

*Keywords:* quasielastic scattering of slow neutrons, self-diffusion coefficient, single-particle and collective components of the self-diffusion coefficient, cluster, ethanol, diluted water-alcohol solutions.

### **REFERENCES**

1. [M.F. Vuks. \*Scattering of Light in Gases, Liquids and Solutions\* \(Leningrad: Publishing House of the Leningrad University, 1977\) 320 p. \(Rus\)](#)
2. [I.R. Prigozhin. \*Molecular Theory of Solutions\* \(Moskva: Metallurgiya, 1990\) 360 p. \(Rus\)](#)
3. [V.E. Chechko et al. Clusterization and anomalies of fluctuations in water-alcohol solutions of low concentrations. \*Zhurnal Fizychnykh Doslidzenh \(Journal of Physical Studies\)\* 7\(2\) \(2003\) 175.](#)

4. V.Ya. Gotsulskiy, V.E. Chechko, Yu.A. Melnik. The origin of light scattering by aqueous solutions of alcohols in vicinities of their singular points. [Ukrayinskyy Fizychnyy Zhurnal \(Ukr. J. Phys.\) 60\(8\) \(2015\) 782.](#)
5. N.P. Malomuzh, E.L. Slinchak. The cluster structure of dilute aqueous-alcohol solutions and molecular light scattering in them. [Russ. J. Phys. Chem. 81\(11\) \(2007\) 1777.](#)
6. G.D. Parfitt, J.A. Wood. Light scattering from binary mixtures of water, methanol and ethanol. [Trans. Faraday Soc. 64 \(1968\) 2081.](#)
7. M.F. Vuks, L.V. Shurupova. Light scattering and phase transitions in aqueous solutions of simple alcohols. *Optika i Spektroskopija* 40(1) (1976) 154 (Rus).
8. L. Van Hove. Correlations in space and time and Born approximation scattering in systems of interacting particles. [Phys. Rev. 95 \(1954\) 249.](#)
9. L. Van Hove. A remark on the time-dependent pair distribution. [Physica 24 \(1958\) 404.](#)
10. V.S. Oskotsky. To the theory of quasielastic scattering of cold neutrons in a liquid. *Fizika Tverdogo Tela* 5(4) (1963) 1082. (Rus)
11. G.K. Ivanov. Elastic and quasielastic scattering of neutrons by molecules. [J. Exp. Theor. Phys. 50\(3\) \(1966\) 726.](#) (Rus)
12. G.K. Ivanov. The role of diffusion processes in the scattering of slow neutrons in liquids. [J. Exp. Theor. Phys. 51\(4\) \(1966\) 1120.](#) (Rus)
13. L.A. Bulavin, G.M. Verbinskya, V.V. Krotenko. Single-particle and collective contributions to the self-diffusion coefficient of methyl alcohol. *Fizika Zhidkogo Sostoyaniya* 19 (1991) 40. (Rus)
14. L.A. Bulavin et al. *Neutron Spectroscopy of Condensed Environments* (Kyiv: Akadempriodyka, 2005) 635 p. (Ukr)

Надійшла/Received 15.05.2023