

# Динамика фрактально-кластерных структур приповерхностного слоя спиртосодержащих водных растворов

В.И. Шостка<sup>1</sup>, Н.В. Шостка<sup>2</sup>, В.И. Вершицкий<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского», Вернадского 4, Симферополь, Россия, 295007

<sup>2</sup>Департамент научно-исследовательской деятельности ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского», Вернадского 4, Симферополь, Россия, 295007

**Аннотация.** В предлагаемой к рассмотрению работе представлены результаты исследования фрактально-кластерных структур, сформированных в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов. Молекулы спирта, имеющие больший размер, чем молекулы воды, при встраивании в структуру воды существенно нарушают её, вследствие чего изменяется структура системы и ее свойства. В связи с чем проведены исследования зависимостей коэффициента поверхностного натяжения и показателя преломления спиртосодержащих водных растворов от концентрации спирта в воде.

Обнаружено, что, чем выше концентрация спирта в воде, тем сильнее структура раствора изменяется и в диапазоне средних концентраций спирта в водном растворе, не смотря на некоторую стабилизацию структуры системы, растворы в ней имеют существенную неоднородность в виде изменяющихся фрактально-кластерных структур. Для визуализации этих структур в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов, в работе был применен метод лазерной интерферометрии. На основе проведенных исследований показаны возможные механизмы перехода фрактально-кластерных структур воды при взаимодействии с этанолом в пространственные кластеры. Предложены возможные модели и структурные схемы образования устойчивых кластеров этилового спирта в воде.

## 1. Введение

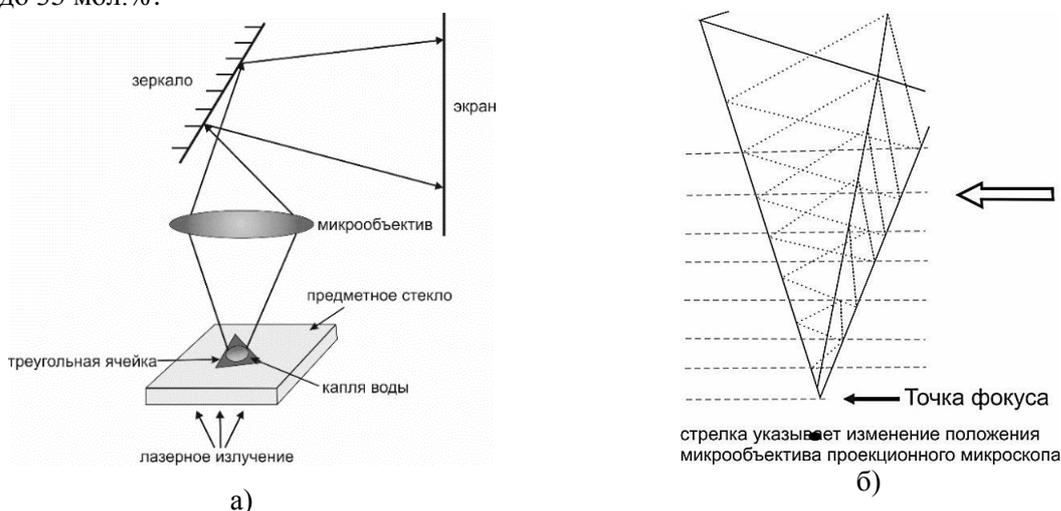
В последние годы уделяется достаточно много внимания исследованиям, связанным с кластерной структурой воды. Однако, взаимодействие воды со спиртами с точки зрения изменения структуры их водных растворов практически не изучено. Причем до сих пор не удавалось исследовать изменения в структуре спиртосодержащих водных растворов. В связи с чем данное исследование является актуальным как с чисто научной точки зрения, так и с точки зрения практического применения данных растворов в фармакологии, медицине и пищевой промышленности. Как известно вода и спирты относятся к ассоциированным жидкостям, в которых ассоциация обусловлена наличием водородных связей между атомами водорода одной молекулы и атомами кислорода другой молекулы. При этом энергия водородных связей значительно слабее энергии ковалентных связей между кислородом и водородом [1]. Ассоциаты в воде могут распадаться и вновь образовываться в различных комбинациях. Как

показано в работе [2], более устойчивыми являются сдвоенные молекулы воды, имеющие по две водородные связи. В отличие от воды в этиловом спирте и его водных растворах могут образовываться ассоциаты не только в виде цепей, но и в виде плоских колец [3]. Таким образом водно-спиртовые растворы представляют собой смешанные ассоциаты. Структура формирования кластеров в этих растворах на сегодняшний день практически не изучена.

Целью данной работы является исследование фрактально-кластерных структур, сформированных в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов.

## 2. Основная часть

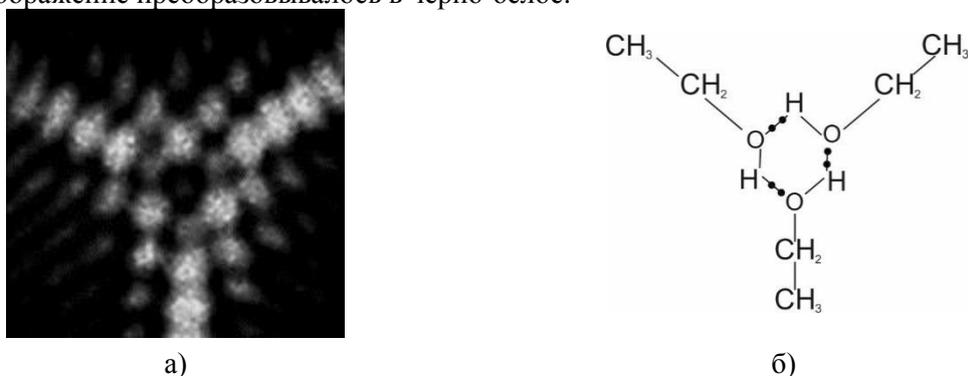
Предполагается, что большая часть воды сохраняет тетраэдрическую структуру. Молекулы спирта, имеющие больший размер, при встраивании в структуру воды нарушают ее, в то время как встраивание молекул воды в структуру спирта не сопровождается существенным изменением последней. При растворении небольшого количества спирта структура воды все же сохраняется, хотя и претерпевает небольшую деформацию. С дальнейшим повышением концентрации спирта структура воды нарушается. В области средних концентраций спирта устанавливается динамическое равновесие ассоциатов из одинаковых молекул, агрегатов из разнородных молекул и одиночных молекул спирта и воды, то есть происходит стабилизация структуры системы. При больших концентрациях спирта в растворе преобладает структура спирта с включенными в неё молекулами воды. Смешивание спирта с водой сопровождается выделением тепла и контракцией (сжатием) смеси. Причина сжатия заключается в образовании ассоциативных связей, что и приводит к уплотнению молекул и уменьшению суммарного объема системы. Подбор растворов этанола в водных растворах осуществлялся на основании результатов рефрактометрических измерений зависимости изменения показателя преломления раствора и коэффициента поверхностного натяжения поверхностного слоя раствора от концентрации этанола в бидистиллированной воде. В результате для проведения исследований изменения кластерной структуры приповерхностного слоя были выбраны растворы спиртосодержащих водных растворов в диапазоне изменения концентраций этанола в воде от 30 до 35 мол. %.



**Рисунок 1.** Схема экспериментальной установки по визуализации кластерных структур (а) и расположение срезов (б) в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов при прохождении лазерного излучения сквозь треугольную ячейку с раствором.

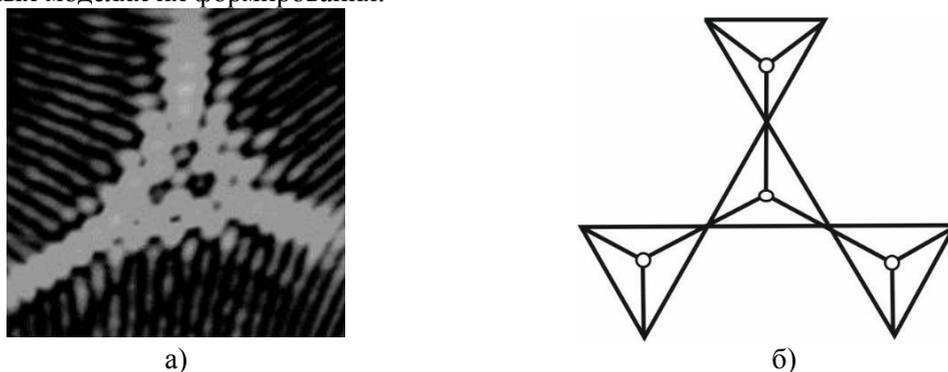
Для визуализации кластерных структур в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов нами был применен проекционный микроскоп, с помощью которого расширенный лазерный пучок, пройдя через слой капли спиртосодержащего водного раствора, помещенной в треугольную ячейку на предметном столике, проецировался на экран и снимался цифровой фотокамерой высокого разрешения, которая фиксировала фрактальные срезы приповерхностного слоя раствора в течение времени ее испарения (Рисунок 1) [4,5]. В работе

применялись полупроводниковые лазеры мощностью порядка 40 мВт с длинами волн синего ( $\lambda = 0,409$  мкм), зеленого ( $\lambda = 0,538$  мкм) и красного ( $\lambda = 0,63$  мкм) цветов. Диаметр пучка излучения лазеров, падающего на треугольную ячейку с исследуемым раствором, порядка 0,6 – 0,8 мм. Фрагменты полученных изображений увеличивались в 10 – 20 раз, для лучшей визуализации изображение преобразовывалось в черно-белое.

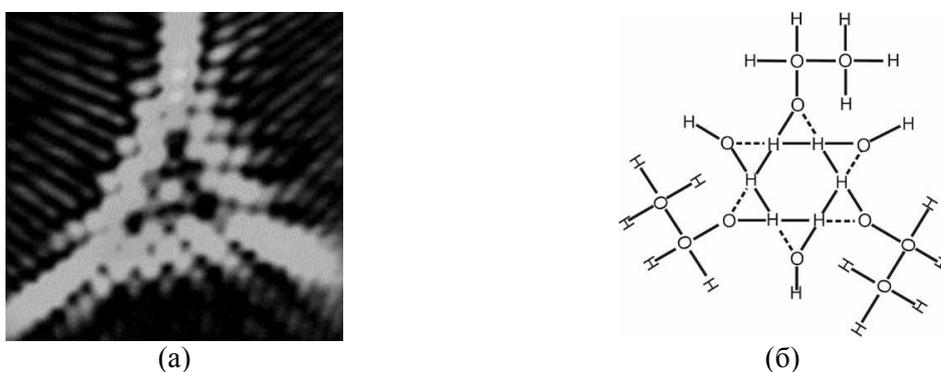


**Рисунок 2.** Кластерная структура гексагонального вида водного раствора этанола (а) и ее возможная модель (б).

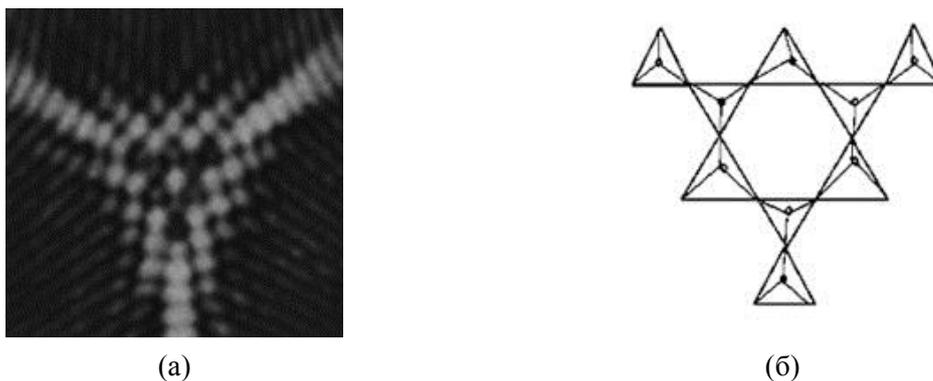
Примеры некоторых из зафиксированных фрактально-кластерных структур приповерхностного слоя спиртосодержащего водного раствора при концентрации в 32 мол. % при комнатной температуре в процессе высыхания треугольной капли представлены на рисунках и в возможных моделях их формирования.



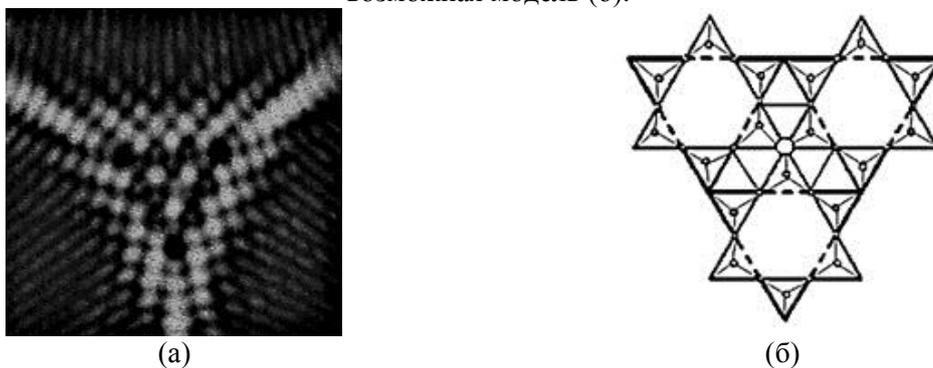
**Рисунок 3.** Кластерная структура, сформированная из тетраэдров водного раствора этанола (а) и ее возможная модель (б).



**Рисунок 4.** Структура кластера замкнутого типа раствора этилового спирта в воде (а) и ее возможная модель (б).



**Рисунок 5.** Структура кластера этилового спирта в воде типа шестиконечной звезды (а) и ее возможная модель (б).



**Рисунок 6.** Структура кластера с 18-тью центрами водородных связей в спиртосодержащем растворе (а) и ее возможная модель (б).

### 3. Заключение

Таким образом данная работа представляет собой междисциплинарное исследование, в котором применен простой метод, позволяющий фиксировать при комнатной температуре кластерную структуру спиртосодержащих водных растворов. Впервые визуализированы и идентифицированы кластеры в приповерхностном слое спиртосодержащих водных растворов.

### 4. Литература

- [1] Лаптев, Б.И. Процессы структурообразования в воде и водных растворах / Б.И. Лаптев, Г.Н. Сидоренко, Н.П. Горленко, Ю.С. Саркисов, Л.В. Антошкин // Вода и экология. Проблемы и решения. – 2012. – № 2/3. – С. 26-33.
- [2] Першина, Е.Д. Проводимость водных сред как альтернатива электронного и ионного переноса / Е.Д. Першина, К.А. Каздобин // Химия и технология воды. – 2008. – Т. 30, № 6. – С. 627-642.
- [3] Shostka, V.I. Vortical structure of wave caustics / V.I. Shostka, S.N. Lapaeva, V.I. Vershitsky // Proceedings of SPIE. – 2004. – Vol. 5582. – P. 187-195.
- [4] Шостка, В.И. Формирование кластерных структур в воде / В.И. Шостка, Н.В. Шостка, И.Л. Доненко // Взгляд молодых на проблемы региональной экономики – 2017: материалы Всероссийского открытого конкурса студентов вузов и молодых исследователей. – Тамбов, 2017. – С. 41-44.
- [5] Шостка, В.И. Визуализация кластерной структуры воды в приповерхностном слое при возбуждении лазерным излучением / В.И. Шостка, Н.В. Шостка, В.И. Вершицкий // Мат. Межд. конф. "Digital Singular Optics: Applications and Fundamentals" (DSOAF'2018). – Sevastopol, September, 17-21 2018. – С.50-51.

## Dynamics of fractal-cluster structures of the surface layer of alcohol-containing aqueous solutions

V.I. Shostka<sup>1</sup>, N.V. Shostka<sup>2</sup>, V.I. Vershitsky<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of physics and technology, V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Vernadsky Avenue 4, Simferopol, Russia, 295007

<sup>2</sup> Scientific Department, V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Vernadsky Avenue 4, Simferopol, Russia, 295007

**Abstract.** The considered paper presents the results of the study of fractal-cluster structures formed in the near-surface layer of alcohol-containing aqueous solutions. Molecules of alcohol, having a larger size than water molecules, when embedded in the structure of water, significantly violate it, as a result, the structure of the system and its properties change. Investigations of the dependences of the surface tension coefficient and the refractive index of alcohol-containing aqueous solutions on the concentration of alcohol in water have been carried out.

It was found that the higher the alcohol concentration in water, the stronger the structure of the solution changes, and in the range of average concentrations of alcohol in an aqueous solution, in spite of some stabilization of the system structure, the solutions in it have a substantial heterogeneity in the form of changing fractal-cluster structures.

To visualize these structures in the near-surface layer of alcohol-containing aqueous solutions, laser interferometry was used in the work. On the basis of this research possible mechanisms for the transition of fractal-cluster water structures in the interaction with ethanol into spatial clathrates are shown. Possible models and structural schemes for the formation of stable clusters of ethyl alcohol in water are proposed.