

Л.А. БУЛАВІН,<sup>1</sup> Є.Г. РУДНІКОВ<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601)<sup>2</sup> Національний технічний університет України  
"Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"  
(Просп. Перемоги, 37, Київ 03056; e-mail: erudni67@gmail.com)**ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ТА ХІМІЧНОГО  
ПОТЕНЦІАЛУ НА ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ  
КОЕФІЦІЄНТ –  $(\partial V/\partial P)_T$  ВОДИ**УДК 532.13, 577.322.3,  
577.356

На основі існуючих літературних даних проведені розрахунки з подальшим аналізом температурних та хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта –  $(\partial V/\partial P)_T$  для води у стані рідини. Проведено порівняння знайденого коефіцієнта для води та аргону. З урахуванням принципу відповідних станів підтверджено існування області термодинамічної подібності між ними. Разом з тим, існує область термодинамічних параметрів, в якій зазначена подібність між водою та аргонем не спостерігається. Показано, що для води існує особлива температура  $(42,0 \pm 0,2)^\circ\text{C}$ , за якої крива температурної залежності термодинамічного коефіцієнта –  $(\partial V/\partial P)_T$  уздовж лінії рівноваги рідина–пара проходить через мінімум. Вказана особливість приводить до особливості поведінки термодинамічного коефіцієнта –  $(\partial V/\partial P)_T$  води, чого не спостерігається для аргону. Показано, що для води існує особливе значення хімічного потенціалу, за якого крива хімпотенціальної залежності термодинамічного коефіцієнта –  $(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування рідина–пара також має мінімум. Крім того, у потрійній точці води термодинамічний коефіцієнт –  $(\partial V/\partial P)_T$  як функція хімічного потенціалу досягає максимального значення.

**Ключові слова:** вода, аргон, ізотермічна стисливість, хімічний потенціал, крива співіснування рідина–пара, крива співіснування рідина–тверде тіло, водневі зв'язки.

**1. Вступ**

Вода у рідкому стані за своїми властивостями є, мабуть, найбільш унікальною з існуючих у природі рідин, з певними аномальними властивостями [1, 2], має також певні особливості як розчинник [3–5] і в умовах обмеженої геометрії [6, 7]. З іншого боку, атомарну рідину аргон можна вважати рідиною найбільш простою за своєю будовою [8, 9], що спонукає проводити порівняння їх фізичних властивостей.

З цією метою у роботі для води та аргону проведено порівняння температурних та хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта

та  $-(\partial V/\partial P)_T = \beta_T V$ , пов'язаного з механічною характеристикою – ізотермічною стисливістю  $\beta_T = -(\partial V/\partial P)_T/V$  [10], що визначає механічний відгук термодинамічної системи на зовнішню дію і який пов'язаний із парним корелятором теплових флуктуацій  $\langle \Delta V \Delta V \rangle$  [11]:

$$\langle \Delta V \Delta V \rangle = -(\partial V/\partial P)_T / (k_B T) = \beta_T V / (k_B T). \quad (1)$$

Тут  $V = 1/\rho$  – питомий об'єм, що вимірюється в одиницях  $\text{м}^3/\text{кг}$ ,  $\rho$  – масова густина.

Відомо, що уздовж кривої співіснування температурна залежність стисливості води проходить через мінімум поблизу температури  $\theta = 46,4^\circ\text{C}$  [12, 13]. У роботі [14] аналізуються фізичні причини виникнення цього мінімуму.

Метою даної роботи є розрахунок та аналіз температурних і хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта –  $(\partial V/\partial P)_T$  для води у рідкому стані в області відносних температур  $T/T_c < 0,7$  (де  $T_c$  – критична температура води)

Цитування: Булавін Л.А., Рудніков Є.Г. Вплив температури та хімічного потенціалу на термодинамічний коефіцієнт –  $(\partial V/\partial P)_T$  води. *Укр. фіз. журн.* **68**, № 6, 390 (2023). Citation: Bulavin L.A., Rudnikov Ye.G. Influence of the temperature and chemical potential on the thermodynamic coefficient –  $(\partial V/\partial P)_T$  of water. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 6, 390 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujpe68.6.390>.

**390**ISSN 0372-400X. *Укр. фіз. журн.* 2023. Т. 68, № 6

та порівняння вказаних залежностей води з аналогічними для аргону.

## 2. Методика розрахунку температурних та хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта $-(\partial V/\partial P)_T$ для води та аргону

Розрахунки термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  проведено нами із використанням найбільш надійних експериментальних даних про термодинамічні властивості води та аргону, які наявні у сучасних довідниках [15, 16] та фізичних базах даних [17–21]. Методика розрахунку температурних та хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  полягає у такому.

На першому етапі розраховуються температурні та баричні залежності залежностей термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$ . У загальному випадку, для отримання баричних залежностей похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж ізотерм необхідно провести диференціювання за тиском баричних залежностей питомого об'єму рідкої фази  $V = 1/\rho$  уздовж ізотерм, які закінчуються на кривій співіснування рідина-пара. При цьому кінцеві точки ізотерм баричних залежностей величини  $-(\partial V/\partial P)_T$ , що містяться на кривій співіснування, визначають температурну залежність величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування. Значення термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  на ізотермах за певних фіксованих значень тиску визначають температурну залежність величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж ізобар.

На другому етапі для визначення початку відліку та масштабу зміни хімічного потенціалу задається вибраний в певний спосіб початок відліку для ентропії та внутрішньої енергії системи.

Далі, базуючись на етапах 1 та 2, здійснюється перехід від змінних температура-тиск до змінних температура-хімпотенціал.

Розглянемо вказані етапи розрахунків більш детально.

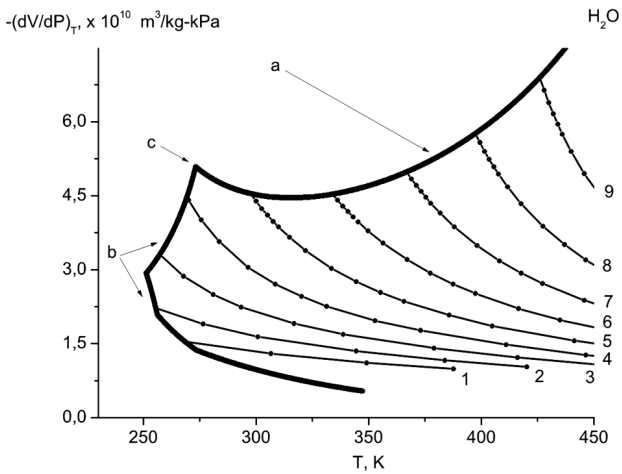
У сучасних термодинамічних базах даних (Minrefprop [17], SRD69 [18], Coolprop [19], Refprop [22], WTT [23], ThermdataEngine [24]) температурні та баричні залежності основних термодинамічних величин, зокрема густини  $\rho$ , задаються у вигляді аналітичних функцій. При цьому похиб-

ка первісних експериментальних даних визначає і похибку фізичних величин, що розраховані за їх допомогою. Наприклад, похибка визначених нами температур є сумарною похибкою представлених у літературі похибок відповідних експериментальних досліджень. Зокрема, для температури визначеного нами мінімуму термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  води вона становить 0,2 К [25].

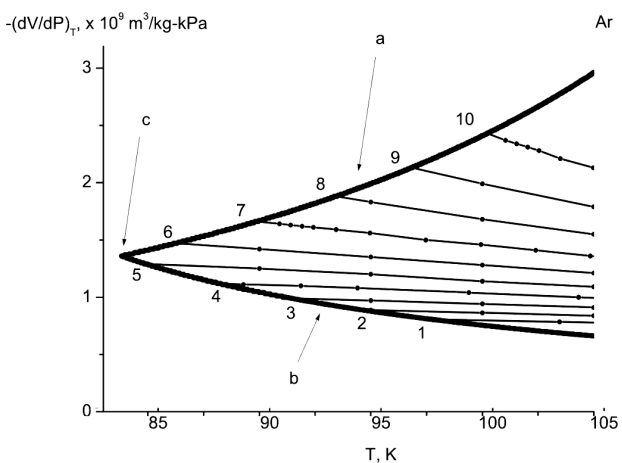
Внаслідок таких розрахунків баричні та температурні залежності густини  $\rho$ , питомого об'єму  $V$ , стисливості  $\beta_T$  та термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$ , у площині температура-тиск утворюють сітку, яка обмежена з боку малих тисків кривою співіснування рідина-пара. Розрахунки відповідних фізичних величин проводились нами у вузлах такої сітки та уздовж кривої співіснування.

Під час послідовного розрахунку температурних та баричних залежностей величин  $\rho$ ,  $V$ ,  $\beta_T$ ,  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води та для аргону в області температур від точки плавлення до температур  $T/T_c < 0,7$  та тисків від  $P/P_c > 0,02$  до кривої співіснування рідина-тверде тіло, кожна з ізотерм та ізобар було поділено не менш ніж на  $10^3$  еквідистантних точок. Проведена перевірка показує, що за такого розбиття інтервалу температур прямі розрахунки термодинамічної похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  та аналітичні розрахунки, які проводились шляхом диференціювання аналітичних функцій, відрізняються не більше ніж на 1%. При цьому температурні та баричні залежності стисливості  $\beta_T$  та термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  є якісно подібними.

Після отримання температурних та баричних залежностей похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  здійснювався перехід до змінних температура-хімічний потенціал. Під час таких розрахунків необхідно вибрати початок відліку для ентропії  $S/m$  та внутрішньої енергії  $E/m$ . Запропонований нами підхід полягає у виборі початку відліку ентропії  $S/m$  від абсолютного нуля температур у відповідності до теореми Нернста, а внутрішньої енергії  $E/m$  від точки плавлення у рідкій фазі на кривій співіснування рідина-пара. Основним аргументом запропонованого підходу у виборі початку відліку  $S/m$  та  $E/m$  є виконання закону відповідних станів [26, 27]. Згідно з проведеними нами розрахунками, при зазначеному підході у виборі початку відліку  $S/m$  та  $E/m$ , для критичних параметрів низки речовин закон відповідних станів виконується, що дозво-



**Рис. 1.** Температурні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж сімейства ізохімпотенціальних кривих: 1 –  $-600$  кДж/кг, 2 –  $-750$  кДж/кг, 3 –  $-900$  кДж/кг, 4 –  $-1050$  кДж/кг, 5 –  $-1200$  кДж/кг, 6 –  $-1350$  кДж/кг, 7 –  $-1500$  кДж/кг, 8 –  $-1650$  кДж/кг, 9 –  $-1800$  кДж/кг, уздовж кривої співіснування рідина–пара та уздовж кривої співіснування рідина–тверде тіло для води у рідкому стані в інтервалі температур  $T \leq 450$  К ( $T/T_c < 0,7$ ): *a* – крива співіснування рідина–пара, *b* – крива співіснування рідина–тверде тіло, *c* – потрійна точка



**Рис. 2.** Температурні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж сімейства ізохімпотенціальних кривих: 1 –  $-90$  кДж/кг, 2 –  $-95$  кДж/кг, 3 –  $-100$  кДж/кг, 4 –  $-105$  кДж/кг, 5 –  $-110$  кДж/кг, 6 –  $-115$  кДж/кг, 7 –  $-120$  кДж/кг, 8 –  $-125$  кДж/кг, 9 –  $-130$  кДж/кг, 10 –  $-135$  кДж/кг, уздовж кривої співіснування рідина–пара та уздовж кривої співіснування рідина–тверде тіло для аргону у рідкому стані в інтервалі температур  $T \leq 105$  К ( $T/T_c < 0,7$ ): *a* – крива співіснування рідина–пара, *b* – крива співіснування рідина–тверде тіло, *c* – потрійна точка

ляє кількісно прогнозувати критичні значення ентропії  $S/m$ , внутрішньої енергії  $E/m$  та хімічного потенціалу  $\mu$  для всіх молекулярних рідин.

Надалі перехід від змінних температура-тиск до змінних температура-хімічний потенціал здійснювався таким чином. Для кожного значення температури розраховувались залежності хімічного потенціалу  $\mu$  та термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  від тиску. Після цього на знайдених залежностях за допомогою програмного забезпечення відбираються еквідистантні значення хімічного потенціалу та відповідні їм значення термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$ . При цьому у площині температура-хімічний потенціал утворюється сітка з еквідистантними значеннями температури та хімічного потенціалу, у вузлах якої значення термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  визначено. Така процедура проводилась нами в області існування рідкого стану рідини, що обмежена температурами  $T/T_c < 0,7$  та кривими співіснування рідина–пара та рідина–тверде тіло.

### 3. Порівняння особливостей

поведінки  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води та аргону

#### 3.1. Температурні залежності величини $-(\partial V/\partial P)_T$

На рис. 1 та рис. 2 наведено розраховані нами за допомогою описаної вище методики температурні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води та аргону уздовж певних ізохімпотенціальних ліній для температур  $T/T_c < 0,7$ .

Ізохімпотенціальні криві величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  води та аргону розташовані між кривими співіснування рідина–пара та рідина–тверде тіло. Форма кривих співіснування рідина–пара та рідина–тверде тіло для води та аргону на цих рисунках є суттєво відмінною. Порівнюючи температурні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$ , представлених на рис. 1 та рис. 2, бачимо, що для води існує особлива температура  $T = (315,15 \pm 0,2)$  К ( $\theta = (42,0 \pm 0,2)$  °C), за якої крива температурної залежності термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж лінії рівноваги рідина–пара (позначена (1) на рис. 1) проходить через мінімум.

Як для води, так і для аргону ізохімпотенціальні криві величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  є монотонно спадаючими функціями температури.

При цьому для аргону  $-(\partial^2(\partial V/\partial P)_T/\partial T^2)_\mu \approx 0$ , у той час як для води уздовж ізохімпотенціальних кривих величини  $-(\partial^2(\partial V/\partial P)_T/\partial T^2)_\mu > 0$ .

### 3.2. Хімпотенціальні залежності величини $-(\partial V/\partial P)_T$

Розраховані нами хімпотенціальні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж певних ізотерм для води та аргону наведені на рис. 3 та рис. 4 відповідно.

Як бачимо з рис. 3 та рис. 4, форма кривих співіснування рідина-пара та рідина-тверде тіло для води та аргону є суттєво відмінною. Ізотерми величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води та аргону розташовані під кривими співіснування рідина-пара та рідина-тверде тіло. При цьому для аргону потрійна точка представлена слабо вираженим ізломом кривої, де крива співіснування рідина-пара для термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  переходить у криву співіснування рідина-тверде тіло. На відміну від аргону, для води у потрійній точці термодинамічний коефіцієнт  $-(\partial V/\partial P)_T$ , як функція хімічного потенціалу, на межі кривої співіснування рідина-пара та рідина-тверде тіло має максимальне значення.

Порівняльний аналіз хімпотенціальних залежностей похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$ , наведених на рис. 3 та рис. 4 показує, що для води окрім особливої температури  $T = (315,15 \pm 0,2)$  К ( $\theta = (42,0 \pm 0,2)$  °С) існує особливе значення хімічного потенціалу, за якого крива хімпотенціальної залежності термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування рідина-пара також проходить через мінімум. При вибраному способі визначення хімічного потенціалу, особливе значення хімічного потенціалу, за якого температурна залежність  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування рідина-пара досягає мінімуму, становить  $\mu_{\min} = -(1122 \pm 1)$  кДж/кг.

Як бачимо, і для води (рис. 3), і для аргону (рис. 4) ізотерми величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  є монотонно спадаючими функціями хімічного потенціалу. Порівняння рис. 3 та рис. 4 дозволяє зробити висновок про те, що відмінне від аргону положення ізотерм води пов'язане із аномальним зростанням її стисливості  $-(\partial V/\partial P)_T/V$  та термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  при збільшенні хімічного потенціалу в області  $\mu > \mu_{\min} = -(1122 \pm 1)$  кДж/кг.

### 3.3. Температурно-хімпотенціальні залежності величини $-(\partial V/\partial P)_T$

Для перевірки застосовності принципу відповідних станів [26, 27] нами проведено порівняльний

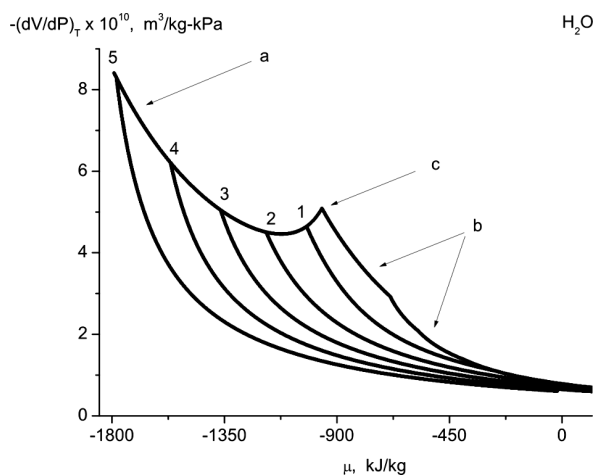


Рис. 3. Хімпотенціальні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж сімейства ізотерм: 1 – 290 К, 2 – 330 К, 3 – 370 К, 4 – 410 К, 5 – 450 К, уздовж кривої співіснування рідина-пара та уздовж кривої співіснування рідина-тверде тіло для води у рідкому стані в інтервалі температур від  $T = 273,15$  К до  $T = 450$  К ( $T/T_c < 0,7$ ): а – крива співіснування рідина-пара, б – крива співіснування рідина-тверде тіло, с – потрійна точка

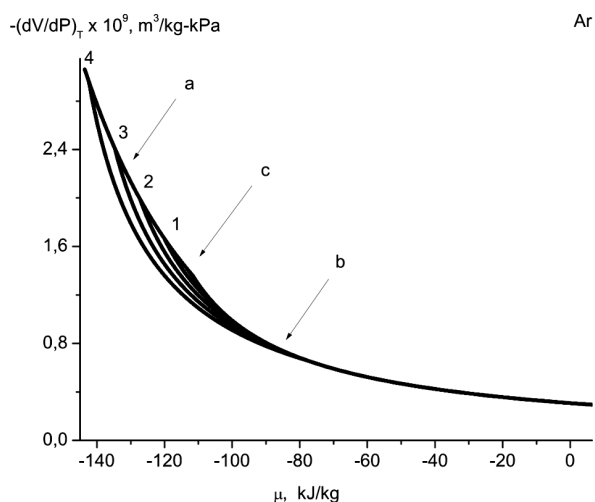
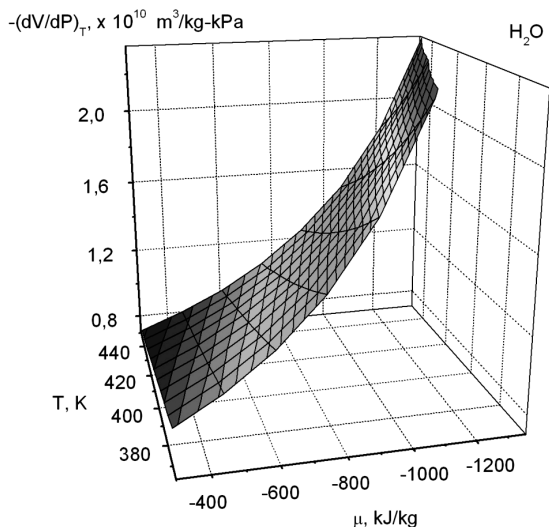
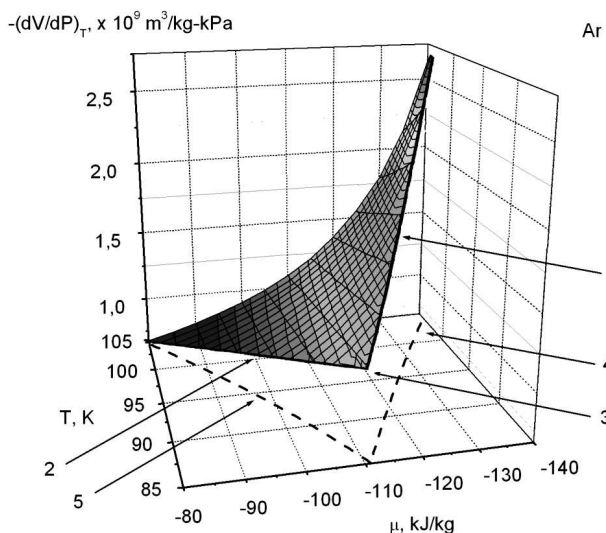


Рис. 4. Хімпотенціальні залежності похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж сімейства ізотерм: 1 – 90 К, 2 – 95 К, 3 – 100 К, 4 – 105 К, уздовж кривої співіснування рідина-пара та уздовж кривої співіснування рідина-тверде тіло для аргону у рідкому стані в інтервалі температур від  $T = 83,8$  К до  $T = 105$  К ( $T/T_c < 0,7$ ): а – крива співіснування рідина-пара, б – крива співіснування рідина-тверде тіло, с – потрійна точка

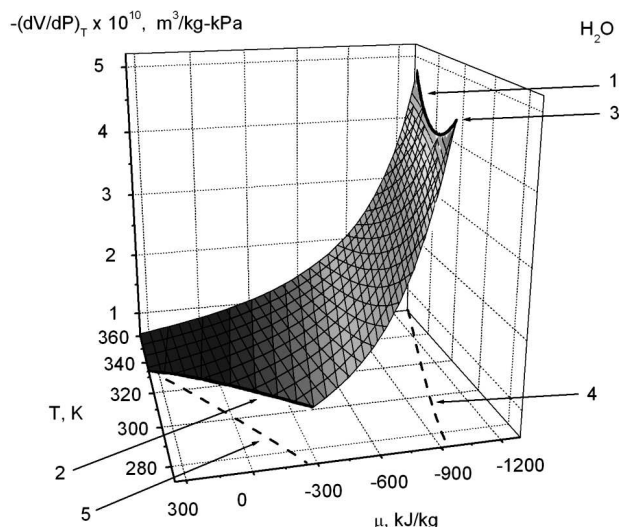


**Рис. 5.** Поверхня температурно-хімпотенціальних залежностей величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води у рідкому стані в інтервалі відносних температур  $0,556 < T/T_c < 0,7$



**Рис. 6.** Поверхня температурно-хімпотенціальних залежностей величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  для аргону у рідкому стані в інтервалі відносних температур  $0,556 < T/T_c < 0,7$ : 1 – крива співіснування рідина–пара, 2 – крива співіснування рідина–тверде тіло, 3 – потрійна точка, 4 – проекція кривої співіснування рідина–пара на площину температура–хімічний потенціал, 5 – проекція кривої співіснування рідина–тверде тіло на площину температура–хімічний потенціал

аналіз температурно-хімпотенціальних залежностей похідної  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води та аргону. Слід відзначити, що незважаючи на суттєву відмінність



**Рис. 7.** Поверхня температурно-хімпотенціальних залежностей величини  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води у рідкому стані в інтервалі відносних температур  $0,422 < T/T_c < 0,556$ : 1 – крива співіснування рідина–пара, 2 – крива співіснування рідина–тверде тіло, 3 – потрійна точка, 4 – проекція кривої співіснування рідина–пара на площину температура–хімічний потенціал, 5 – проекція кривої співіснування рідина–тверде тіло на площину температура–хімічний потенціал

властивостей води та аргону, згідно з [28–30] при  $T < T_c$  ( $T_c$  – критична температура) існує область застосовності принципу відповідних станів. Подібний висновок про існування області термодинамічної подібності було зроблено в [25] на базі аналізу температурно-баричних залежностей термодинамічного коефіцієнта  $(\partial V/\partial T)_P$ . В [25] було показано, що існує як область термодинамічної подібності між водою та аргонем, так і інша область термодинамічних параметрів, у якій їх властивості суттєво відрізняються.

Для порівняльного аналізу цих рідин виділимо область температур  $0,556 < T/T_c < 0,7$ , в якій впливом критичних флуктуацій параметра порядку можна знехтувати. Зауважимо, що відносна температура замерзання для аргону  $T/T_c = 0,556$  ( $T = 83,81$  К) більша, ніж для води  $T/T_c = 0,422$  ( $T = 273,15$  К). У вказаній області температур баричні залежності термодинамічних величин для аргону обмежені з боку високих тисків кривою співіснування рідина–тверде тіло. Ця фізична умова визначає максимальне значення тиску  $P/P_c = 20,56$  ( $P = 1 \cdot 10^5$  кПа), за якого

аргон ще існує у рідкому стані при температурі  $T/T_c = 0,7$  ( $T = 105,48$  К).

Побудуємо тривимірні поверхні температурно-хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води (рис. 5) та аргону (рис. 6) в однаковому інтервалі відносних температур  $0,556 < T/T_c < 0,7$ . Для води це інтервал температур  $359,87$  К  $< T < 452,97$  К, а для аргону – відповідно  $83,81$  К  $< T < 105,48$  К.

Порівняємо поверхні температурно-хімпотенціальних залежностей для води (рис. 5) та аргону (рис. 6) в одному і тому ж інтервалі відносних температур  $0,556 < T/T_c < 0,7$ . Слід зауважити, що на відміну від аргону, для води вибраний інтервал відносних температур та хімічних потенціалів не містить кривих співіснування рідина-пара та рідина-тверде тіло.

Як бачимо з рис. 5 та рис. 6, вказані поверхні якісно подібні. Це підтверджує справедливість принципу відповідних станів у вказаній області температур та хімічних потенціалів для води та аргону і узгоджується із висновками робіт [25, 28–30]. Побудуємо поверхню температурно-хімпотенціальних залежностей води (рис. 7) в інтервалі температур від температури плавлення води  $T = 273,15$  К,  $T/T_c = 0,442$  до температури  $T = 358,89$  К,  $T/T_c = 0,556$ , яка відповідає відносній температурі плавлення аргону  $T = 83,81$  К,  $T/T_c = 0,556$ .

Порівняння рис. 6 та рис. 7 показує, що існує область термодинамічних параметрів, у якій властивості води та аргону суттєво відрізняються. З рис. 7 випливає, що у води для термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  крива співіснування рідина-пара проходить через мінімум, якому відповідають координати  $T_{\min} = (315,15 \pm 0,2)$  К ( $\theta_{\min} = (42,0 \pm 0,2)$  °С) та  $\mu_{\min} = -(1122 \pm 1)$  кДж/кг.

На відміну від аргону, для води при зменшенні температур в області  $T < T_{\min} = (315,15 \pm 0,2)$  К та при збільшенні хімічного потенціалу в області  $\mu > \mu_{\min} = -(1122 \pm 1)$  кДж/кг, термодинамічний коефіцієнт  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування рідина-пара аномально зростає та досягає максимального значення у потрійній точці (див. також рис. 1 та рис. 3).

Представлені вище результати вказують на те, що для води температура  $T = 315$  К є особливою температурою, з якою пов'язані інші особли-

вості поведінки температурних та хімпотенціальних залежностей її термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$ .

На нашу думку, ці особливості води можуть бути пов'язані із структурами її водневих зв'язків відповідно до моделі двох фаз LDW та HDW [31, 32].

#### 4. Висновки

На основі існуючих фізичних баз даних розраховано та проведено порівняльний аналіз температурних і хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  для води і аргону у рідкому стані.

1. Підтверджено існування області термодинамічної подібності між водою та аргонном, яка для термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  спостерігається в інтервалах температур  $0,56 < T/T_c < 0,7$ . Разом із тим, існує область термодинамічних параметрів, у якій властивості води та аргону суттєво відрізняються.

2. Показано, що для води існує особлива температура  $(42,0 \pm 0,2)$  °С, за якої крива температурної залежності термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж лінії рівноваги рідина-пара проходить через мінімум. Ця особливість приводить до інших особливостей поведінки температурних та хімпотенціальних залежностей термодинамічного коефіцієнта води.

3. Показано, що для води існує особливе значення хімічного потенціалу  $-(1122 \pm 1)$  кДж/кг, за якого крива хімпотенціальної залежності термодинамічного коефіцієнта  $-(\partial V/\partial P)_T$  уздовж кривої співіснування рідина-пара також має мінімум.

4. У потрійній точці води, на відміну від аргону, термодинамічний коефіцієнт  $-(\partial V/\partial P)_T$ , як функція хімічного потенціалу, на межі кривої співіснування рідина-пара та рідина-тверде тіло досягає максимального значення.

- G.M. Kontogeorgis, A. Holster, N. Kottaki, E. Tsochantaris, F. Topsøe, J. Poulsen, M. Bache, X. Liang, N.S. Blom, J. Kronholm. Water structure, properties and some applications. *A review, Chemical Thermodynamics and Thermal Analysis* **6**, 100053 (2022).
- H. Tanaka. Roles of liquid structural ordering in glass transition, crystallization, and water's anomalies. *J. Non-Crystalline Solids: X* **13**, 100076 (2022).
- O.V. Tomchuk, L.A. Bulavin, V.L. Aksenov, V.M. Garamus, O.I. Ivankov, A.Y. Vul', A.T. Dideikin, M.V. Avde-

- ev. Small-angle scattering from polydisperse particles with a diffusive surface. *J. Appl. Crystallography* **47** (2), 642 (2014).
4. E.A. Kyzyma, A.A. Tomchuk, L.A. Bulavin, V.I. Petrenko, L. Almásy, M.V. Korobov, D.S. Volkov, I.V. Mikheev, I.V. Koshlan, N.A. Koshlan, P. Bláha, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov. Structure and toxicity of aqueous fullerene C<sub>60</sub> solutions. *J. Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **9**, 1 (2015).
  5. V.I. Petrenko, O.P. Artykulnyi, L.A. Bulavin, L. Almásy, V.M. Garamus, O.I. Ivankov, N.A. Grigoryeva, L. Vekas, P. Kopcansky, M.V. Avdeev. On the impact of surfactant type on the structure of aqueous ferrofluids. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* **541**, 222 (2018).
  6. A.V. Chalyi, A.N. Vasil'ev. Correlation properties, critical parameters and critical light scattering in finite-size systems. *J. Molecular Liquids* **84** (2), 203 (2000).
  7. A.V. Chalyi, A.N. Vasil'ev, E.V. Zaitseva. Synaptic transmission as a cooperative phenomenon in confined systems. *Condensed Matter Physics* **20** (1), 13804-1-12 (2017).
  8. Ch. Tegeler, R. Span, W. Wagner. A new equation of state for argon covering the fluid region for temperatures from the melting line to 700 K at pressures up to 1000 MPa. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **28** (3), 779 (1999).
  9. R. Span, and W. Wagner. Equations of state for technical applications. ii. results for nonpolar fluids. *Int. J. Thermophys.* **24** (1), 41 (2003).
  10. F. Mallamace, C. Corsaro, H.E. Stanley. A singular thermodynamically consistent temperature at the origin of the anomalous behavior of liquid water. *Sci. Rep.* **2**, 993 (2012).
  11. J.H.S. Lee, K. Ramamurthi. *Fundamentals of Thermodynamics* (CRC Press, 2022) [ISBN: 1032123125, 9781032123127].
  12. L.N. Dzhavadov, V.V. Brazhkin, Yu.D. Fomin, V.N. Ryzhov, E.N. Tsiok. Experimental study of water thermodynamics up to 1.2 GPa and 473 K. *J. Chem. Phys.* **152**, 154501 (2020).
  13. K.H. Kim, A. Späh, H. Pathak, F. Perakis, D. Mariédahl, K. Amann-Winkel, J.A. Sellberg, J.H. Lee, S. Kim, J. Park, K.H. Nam, T. Katayama, A. Nilsson. Maxima in the thermodynamic response and correlation functions of deeply supercooled water. *Science* **358**, 1589 (2017).
  14. F. Mallamace, C. Corsaro, D. Mallamace, C. Vasic, H.E. Stanley. The thermodynamical response functions and the origin of the anomalous behavior of liquid water. *Faraday Discussions* **167**, 95 (2013).
  15. C. Yaws. *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons. Second Edition* (Gulf Professional Publishing, 2014) [ISBN: 978-0-323-28659-6].
  16. M.Z. Southard, D.W. Green. *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (Mcgraw-Hill Education, 2019) [ISBN: 9780071834087].
  17. MiniRefprop Database, NIST (<https://trc.nist.gov/refprop/MINIREF/MINIREF.HTM>).
  18. SRD69 Database, Thermophysical Properties of Fluid Systems, Peter Linstrom (2017), NIST Chemistry WebBook – SRD 69, National Institute of Standards and Technology.
  19. Coolprop Database I.H. Bell, J. Wronski, S. Quoilin, V. Lemort. Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library cool prop. *Ind. Eng. Chem. Res.* **53** (6), 2498 (2014).
  20. MOL-Instincts Database, ChemEssen. <https://www.molinstincts.com/>.
  21. ChemRTP Database, ChemEssen. <http://www.chemrtp.com/>.
  22. Refprop Database, NIST. <https://www.nist.gov/programs-projects/reference-fluid-thermodynamic-and-transport-properties-database-refprop>.
  23. WTT Database, NIST. <https://wtt-pro.nist.gov/wtt-pro/>.
  24. ThermodataEngine Database, NIST. <https://trc.nist.gov/tde.html>.
  25. L.A. Bulavin, E.G. Rudnikov. Temperature and pressure effect on the thermodynamics coefficient  $(\partial V/\partial T)_P$  of water. *Ukr. J. Phys.* **68** (2), 122 (2023).
  26. I.I. Novikov. Thermodynamic similarity and prediction of the properties and characteristics of substances and processes. *J. Engin. Phys. Fundamentals of Thermodynamic* **53**, 1227 (1987).
  27. H.W. Xiang. *The Corresponding-States Principle and its Practice. Thermodynamic, Transport and Surface Properties of Fluids* (Elsevier Science, 2005) [ISBN: 978-0-444-52062-3].
  28. A.I. Fisenko, N.P. Malomuzh, A.V. Oleynik. To what extent are thermodynamic properties of water argon-like? *Chem. Phys. Lett.* **450** (4-6), 297 (2008).
  29. I.V. Zhyganiuk, M.P. Malomuzh. Physical nature of hydrogen bond. *Ukr. J. Phys.* **60** (9), 960 (2015).
  30. L.A. Bulavin, V.Ya. Gotsulskyi, N.P. Malomuzh, A.I. Fisenko. Crucial role of water in the formation of basic properties of living matter. *Ukr. J. Phys.* **65** (9), 794 (2020).
  31. M.F. Chaplin. Structure and properties of water in its various states. In: *Encyclopedia of Water: Science, Technology, and Society*. Edited by P.A. Maurice (Wiley, 2019), 1.
  32. L.G.M. Pettersson. A two-state picture of water and the funnel of life. In: *Modern Problems of the Physics of Liquid Systems. Selected Reviews from the 8th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems", Kyiv, Ukraine, May 18-22, 2018. Edited by L. Bulavin, L. Xu* (Springer Cham, 2019).

Одержано 13.06.23

L.A. Bulavin, Ye.G. Rudnikov

#### INFLUENCE OF THE TEMPERATURE AND CHEMICAL POTENTIAL ON THE THERMODYNAMIC COEFFICIENT – $(\partial V/\partial P)_T$ OF WATER

On the basis of available literature data, the temperature,  $T$ , and chemical potential,  $\mu$ , dependences of the thermodynamic

coefficient  $-(\partial V/\partial P)_T$  for water in the liquid state are calculated and analyzed. The coefficient found for water is compared with that for argon. Taking the principle of corresponding states into account, the existence of a region of thermodynamic similarity between those two substances is confirmed. At the same time, there is a region of thermodynamic parameters, where the indicated similarity is not observed. It is shown that, for water, there is a particular temperature of  $(42.0 \pm 0.2)^\circ\text{C}$  at which the  $T$ -dependence of the thermodynamic coefficient  $-(\partial V/\partial P)_T$  along the liquid-vapor equilibrium curve has a minimum. This feature leads to a specific behavior of the ther-

modynamic coefficient  $-(\partial V/\partial P)_T$  for water, which is not observed for argon. It is shown that there is a particular  $\mu$  value for water at which the  $\mu$ -dependence of the thermodynamic coefficient  $-(\partial V/\partial P)_T$  along the liquid-vapor coexistence curve also has a minimum. In addition, at the triple point of water, the thermodynamic coefficient  $-(\partial V/\partial P)_T$  as a function of  $\mu$  reaches a maximum value.

*Keywords:* water, argon, isothermal compressibility, chemical potential, liquid-vapor coexistence curve, liquid-solid coexistence curve, hydrogen bonds.