

Л.А. БУЛАВІН,^{1,2} Ю.Л. ЗАБУЛОНОВ,³ А.М. ГЕТАЛО,⁴ Л.О. МАТЯШ,⁴
С.О. САМОЙЛЕНКО,⁵ О.В. ХОРОЛЬСЬКИЙ,⁴ Є.Г. РУДНІКОВ^{1,6}

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601)

² Інститут проблем безпеки атомних електростанцій НАН України
(Вул. Лисогірська, 12, Київ 03028; e-mail: bulavin221@gmail.com)

³ Інститут геохімії навколишнього середовища НАН України
(Просп. Академіка Палладіна, 34а, Київ 03142)

⁴ Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка
(Вул. Остроградського, 2, Полтава 36003; e-mail: khorolskiy.alexey@gmail.com)

⁵ Полтавський державний медичний університет
(Вул. Шевченко, 23, Полтава 36011; e-mail: s.samoilenko@pdmu.edu.ua)

⁶ Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"
(Просп. Перемоги, 37, Київ 03056; e-mail: erudni67@gmail.com)

ПОРІВНЯННЯ В'ЯЗКОПРУЖНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЛІФАТИЧНИХ СПИРТІВ ТА ЇХ ФТОРЗАМІЩЕНИХ АНАЛОГІВ

УДК 532.13, 577.322.3,
577.356

У роботі проведено порівняння в'язкопружних властивостей рідких аліфатичних спиртів пропанолу-1, пентанолу-1 та гептанолу-1 із властивостями їх фторзаміщених аналогів. Використано експериментальні дані по густині, кінематичній в'язкості та швидкості поширення звуку і симуляції штучними нейронними мережами величин критичних параметрів та параметрів Ван дер Ваальса досліджених рідин. Порівняння властивостей спиртів із властивостями води, в якій є суцільна сітка водневих зв'язків, та властивостями перекису водню, де є водневі зв'язки, але сітка відсутня, показують, що зміна фізичних властивостей при фторзаміщенні пов'язана зі щільністю водневих зв'язків у рідині.

Ключові слова: фторзаміщені спирти, вода, перекис водню, зсувна в'язкість, швидкість звуку, штучні нейронні мережі.

1. Вступ

Дослідження структури і фізичних властивостей одноатомних аліфатичних спиртів і їхніх фторза-

міщених аналогів є одним із актуальних завдань сучасної фізики рідин. Значний інтерес має порівняння фізичних властивостей рідин у межах одного гомологічного ряду та ряду заміщення, отриманих при заміні атомів водню атомами фтору в молекулах фторзаміщених рідин. Проте інформація про надмолекулярну будову і механізми молекулярних процесів, які протікають у фторзаміщених рідинах, є малочисельною, а інколи і суперечливою.

Фторзаміщені спирти знайшли своє застосування у фармакології та органічному синтезі як

Цитування: Булавін Л.А., Забулонов Ю.Л., Гетало А.М., Матяш Л.О., Самойленко С.О., Хорольський О.В., Рудніков Є.Г. Порівняння в'язкопружних властивостей аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів. *Укр. фіз. журн.* **70**, №3, 189 (2025).

© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

специфічні розчинники, як компоненти високотемпературних теплоносіїв, мастильних матеріалів і клеїв, а також при виготовленні пестицидів та полімерних матеріалів [1–3]. Фторзаміщені спирти продовжують опановувати нові сфери застосування, зокрема вони використовуються у біотехнології для стабілізації пептидів [4], біомодифікації ензимів [5], для зміни структури макромолекул білків [6], для модифікації властивостей ліпідних мембран [7] тощо. Незважаючи на широке використання фторзаміщених спиртів у різних галузях, їхні фізичні властивості й досі залишаються малодослідженими.

Дослідження в'язкопружних властивостей дозволяє простежити особливості молекулярних процесів у рідкій фазі вказаних спиртів в залежності від структури молекули речовини, і можуть бути застосовані при вивченні як індивідуальних молекулярних рідин [8–10], так і розчинів високомолекулярних сполук і біополімерів [11–13].

На сучасному етапі прогнозування фізичних властивостей галогензаміщених органічних сполук, з урахуванням їх структури, особливої уваги на сьогодні заслуговує використання штучних нейронних мереж. Як відомо, нейронні мережі потребують достовірних експериментальних даних, а якість їх прогнозу тим вища, чим більше релевантних даних у межах гомологічного ряду.

Оскільки перехід від граничних аліфатичних спиртів до їх фторзаміщених аналогів має впливати на характер водневих зв'язків між молекулами, у роботі проведено порівняння в'язкопружних властивостей вказаних спиртів із відповідними властивостями води, для якої існує суцільна сітка водневих зв'язків та властивостями перекису водню, для якого водневі зв'язки існують, але сітку не утворюють. Наявність водневої сітки у воді приводить до низки унікальних особливостей поведінки води у ролі розчинника [14–16].

Метою роботи є порівняння в'язкопружних властивостей рідких аліфатичних спиртів у межах одного гомологічного ряду з властивостями їх фторзаміщених аналогів з використанням наявних експериментальних даних, модельних рівнянь і даних штучних нейронних мереж.

2. Експеримент і методи розрахунку

Об'єктами дослідження є нормальні аліфатичні спирти марки “ЧДА” пропанол-1 (C_3H_7OH ,

далі – $PrOH$), пентанол-1 ($C_5H_{11}OH$, $PenOH$), гептанол-1 ($C_7H_{15}OH$, $HepOH$), їх фторзаміщені аналоги: 1H,1H,3H-тетрафторпропанол-1 ($HCF_2CF_2CH_2OH$, $4F-PrOH$), 1H,1H,5H-октафторпентанол-1 ($H(CF_2)_4CH_2OH$, $8F-PenOH$), 1H,1H,7H-додекафторгептанол-1 ($H(CF_2)_6CH_2OH$, $12F-HepOH$), а також вода H_2O та перекис водню H_2O_2 .

Усі фторзаміщені спирти мали чистоту 99,0% і були синтезовані відділом хімії фторорганічних сполук Інституту органічної хімії НАН України.

Експериментальні вимірювання реологічних параметрів вказаних спиртів проводилися в інтервалі температур 293–363 К із використанням стандартних методик. Густина (ρ) визначалася пікнометричним методом з похибкою 0,05%. Кінематична в'язкість (ν) досліджувалася методом капілярної віскозиметрії, при цьому похибка вимірювань не перевищувала 1,0%.

Вимірювання швидкості поширення звуку (C) здійснювали імпульсним методом зі зміною відстані на частоті 27,5 МГц, сумарна похибка вимірювань не перевищувала 0,1%. Методику вимірювань швидкості звуку детально описано в [17].

У сучасних термодинамічних базах даних Refprop [18], ThermodataEngine [19], WTT [20] тощо (у відкритому доступі Minirefprop [21], SRD69 [22], Coolprop [23]), температурні залежності основних термодинамічних величин для рідин уздовж кривої співіснування рідина-пара, зокрема густини ρ і зсувної в'язкості $\eta = \rho\nu$, представляються у вигляді певних аналітичних функцій, які використовуються для надійного представлення фізичних величин.

Як розрахунки, так і представлення даних для величини ρ рідин можуть здійснюватись за допомогою рівняння Тейта [24], Хуанг–О'Коннела [25], Кесельмана [26], Бенедікта–Вебба–Рубіна (BWR) [27], його модифікації Старлінгом (BWRS), Якобсоном та Стюардом (mBWR) та інші [28]. Для зсувної в'язкості, відповідно, це рівняння вигляду:

$$\ln(\eta/\eta_0) = \sum_i a_i f(T)^{n_i}, \quad (1)$$

де η_0 , a_i , n_i – сталі величини (рівняння PPDS9, ViscosityL, Yaws.Viscosity, DIPPR101) [19, 20].

За відсутності первісних експериментальних даних температурні залежності густини ρ уздовж

кривої співіснування можна спрогнозувати за допомогою методів Rackett, Gunn–Yamada та Hankinson–Brobst–Thomson [29–31], а температурну залежність зсувної в'язкості η уздовж кривої співіснування за допомогою методів Letsou–Stiel, Joback та Orrick–Erbar [32–34].

Окрім того, такі дані можна отримати методом симуляції із використанням штучних нейронних сіток на базі найбільш надійних експериментальних даних та квантово-механічних розрахунків параметрів молекул, а саме симуляції Mol-instincts [35] або симуляції ChemRTP [36]. Симуляції Mol-instincts дозволяють отримувати температурні залежності термодинамічних величин. У той самий час, симуляції ChemRTP – реперні значення фізичних величин, які слід використовувати у поєднанні із застосуванням сучасних методів термодинамічної подібності [37, 38]. Слід зауважити, що за останні роки методи симуляції на основі штучних нейронних сіток досягли суттєвого прогресу, що дозволяє проводити розрахунки фізичних величин із похибкою, близькою до похибок визначення цих величин у сучасних експериментальних дослідженнях [39, 40].

Згідно з принципом відповідних станів [37, 38], безрозмірності температури T , густини ρ , коефіцієнта адіабатичного стисливості $-(\partial V/\partial P)_S$ здійснювалось за допомогою значень їх критичних параметрів.

Для швидкості поширення звуку

$$C = (\partial P/\partial \rho)_S^{0,5} = V (-(\partial P/\partial V)_S)^{0,5} \quad (2)$$

безрозмірна форма запису представлена у вигляді:

$$\begin{aligned} C^* &= \frac{V}{V_C} \left(- \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \frac{V_C}{P_C} \right)^{0,5} = \\ &= \frac{\rho_C}{\rho} \left(- \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \frac{1}{P_C \rho_C} \right)^{0,5} = C \left(\frac{\rho_C}{P_C} \right)^{0,5}. \end{aligned} \quad (3)$$

Тут питомий об'єм V вимірюється в одиницях $\text{м}^3/\text{кг}$, а густина $\rho = 1/V$ – в одиницях $\text{кг}/\text{м}^3$. Значення критичних параметрів T_C , P_C , ρ_C для аліфатичних спиртів, води та перекису водню було взято з літературних джерел [22, 39, 40], а для фторзаміщених аналогів аліфатичних спиртів через відсутність експериментальних даних було отримано симуляцією за допомогою штучних нейронних сіток [35, 36] і наведено у табл. 1.

3. Порівняння температурних залежностей густини спиртів, води та перекису водню

У зв'язку з тим, що процес фторзаміщення спиртів приводить до змін водневих зв'язків, бажано простежити вплив водневих зв'язків на властивості спиртів. Із цією метою, методами, описаними в розділі 2, були отримані експериментальні дані про густину спиртів, а також розраховані дані про густину води та перекису водню.

На рис. 1 наведені експериментальні дані [8] для температурної залежності густини аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів, а також дані для води та перекису водню з сучасних фізичних баз даних [21–23, 39, 40].

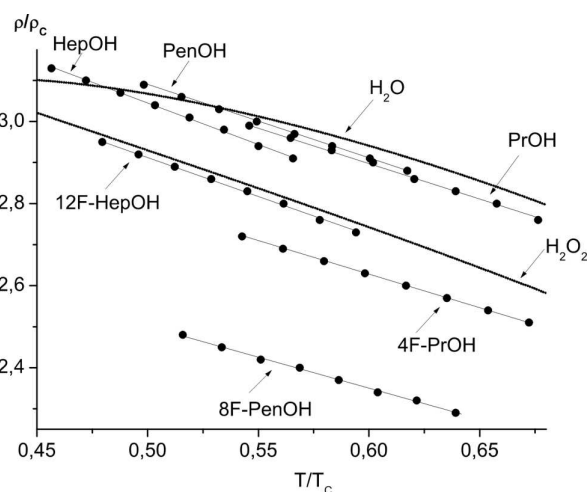


Рис. 1. Температурна залежність густини аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, води та перекису водню

Таблиця 1. Критичні температури (T_C), критичні тиски (P_C) та критичні густини (ρ_C) для аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, а також для води та перекису водню

Рідина	CAS	T_C , К	P_C , кПа	ρ_C , $\text{кг}/\text{м}^3$	Джерело
PrOH	71-23-8	535,9	5197,3	269	[35, 40]
PenOH	71-41-0	588,0	3839,6	264	[35, 40]
HepOH	111-70-6	641,8	3096,0	262	[35, 40]
4F-PrOH	76-37-9	540,0	4124,6	546	[35]
8F-PenOH	355-89-6	568,0	2773,7	673	[35]
12F-HepOH	335-99-9	611,0	2100,3	597	[35]
H ₂ O	7732-18-5	647,1	22064	32,2	[35, 40]
H ₂ O ₂	7722-84-1	727,98	16202	111	[35, 40]

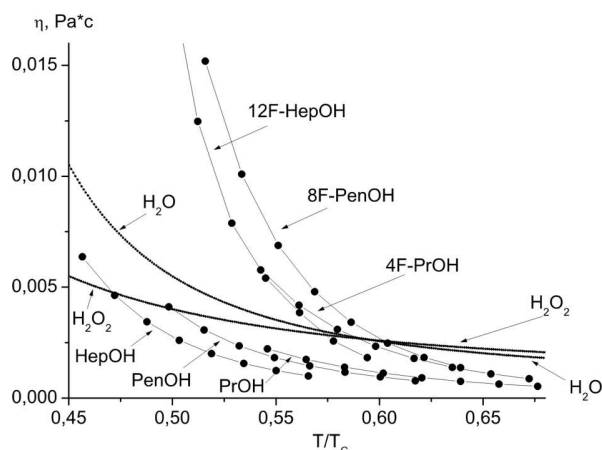


Рис. 2. Температурні залежності зсувної в'язкості для аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, а також для води та перекису водню

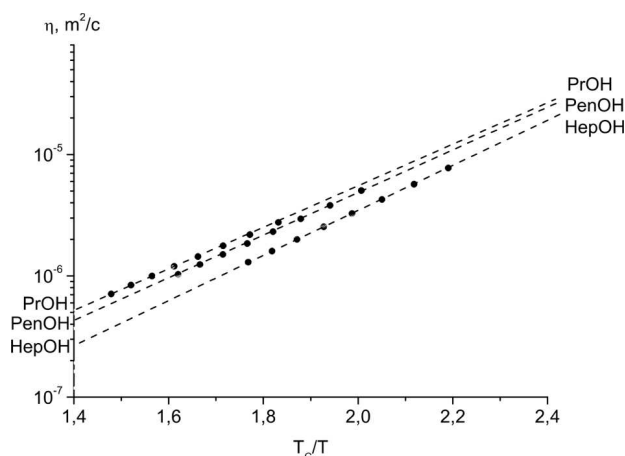


Рис. 3. Температурні залежності логарифма кінематичної в'язкості для аліфатичних спиртів

Аналіз рис. 1 показує, що для граничних аліфатичних спиртів приведена густина за сталої температури із зростанням кількості атомів вуглецю спочатку зростає, а потім приведена густина зменшується. Як бачимо, для фторозаміщених аналогів аліфатичних спиртів густина за сталої температури із зростанням кількості атомів вуглецю навпаки спочатку зменшується, а потім зростає.

Приведена густина фторзаміщених аліфатичних спиртів, на відміну від граничних аліфатичних спиртів, за певної приведеної температури менше 0,68 із зростанням кількості атомів вуглецю спочатку зменшується, а потім зростає. В той час як для незаміщених аліфатичних спиртів приведена

густина за такої ж приведеної температури із зростанням кількості атомів вуглецю спочатку зростає, а потім зменшується.

Слід відзначити, що у воді, де існує сітка водневих зв'язків, приведена густина в області приведених температур вище 0,53 є більшою, ніж для граничних аліфатичних спиртів. У перекису водню, де існують водневі зв'язки, але немає сітки водневих зв'язків, приведена густина для всіх приведених температур є меншою, ніж для граничних аліфатичних спиртів, але більшою, ніж у їх фторзаміщених аналогів.

4. Порівняння температурних залежностей в'язкості спиртів, води та перекису водню

Нами було експериментально отримано кінематичну в'язкість ν аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів. На рис. 2 наведені температурні залежності зсувної в'язкості η , розраховані за експериментальними даними кінематичної в'язкості ν та густини ρ ($\eta = \rho \cdot \nu$) для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів [8–10], а також розраховані за найбільш надійними літературними даними ν та ρ для води та перекису водню [21–23, 39, 40].

Аналіз рис. 2 вказує на якісну відмінність температурних залежностей зсувної в'язкості для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів, які утворюють дві окремі групи температурних залежностей зсувної в'язкості. Температурні залежності зсувної в'язкості для води та перекису водню перетинаються і не є подібними до відповідних залежностей для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів.

Для більш детального порівняння в'язкісних властивостей аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, води та перекису водню, проаналізуємо залежності логарифма кінематичної в'язкості досліджених речовин від оберненої температури. Згідно з [10], вказані залежності для зазначених фторзаміщених спиртів у дослідженому інтервалі температур можна представити прямими лініями. При цьому, згідно з літературними даними [22, 23, 39], для граничних аліфатичних спиртів, наприклад, етанолу, такі залежності залишаються лінійними і у інтервалі приведених обернених температур T_C/T від 1,4 до 2,4. Результати в однаковому масштабі наведено на рис. 3 для граничних

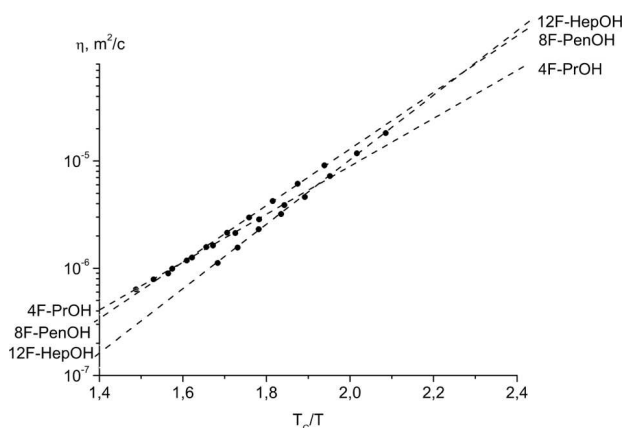


Рис. 4. Температурні залежності логарифма зсувної в'язкості для фторзаміщених аналогів аліфатичних спиртів

спиртів, на рис. 4 для їх фторзаміщених аналогів, а на рис. 5 для води та перекису водню.

Аналіз рис. 3 та рис. 4 вказує на якісну відмінність двох гомологічних рядів спиртів. Для аліфатичних спиртів (див. рис. 3) із зростанням кількості атомів вуглецю від пропанолу до гептанолу за певної однакової температури кінематична в'язкість зменшується в усьому діапазоні приведених температур.

На відміну від цього, для фторзаміщених аналогів (див. рис. 4) за високих температур в околі критичної точки із зростанням кількості атомів вуглецю за певної однакової температури кінематична в'язкість зменшується. Зі зменшенням температури характер відповідних залежностей змінюється на протилежний: в околі температур замерзання за певної однакової температури із зростанням кількості атомів вуглецю кінематична в'язкість збільшується. Для води та перекису водню (див. рис. 5) залежності логарифма кінематичної в'язкості від оберненої температури не є прямими лініями, які між собою перетинаються.

5. Температурні залежності швидкості звуку та коефіцієнта адіабатичної стисливості

Нами були експериментально отримані швидкості поширення звуку C в аліфатичних спиртах і їх фторзаміщених аналогах [9], які наведені на рис. 6. Крім того, на рис. 6 наведені також дані про швидкість поширення звуку у воді та перекису водню, розраховані за методиками, описаними в розділі 2.

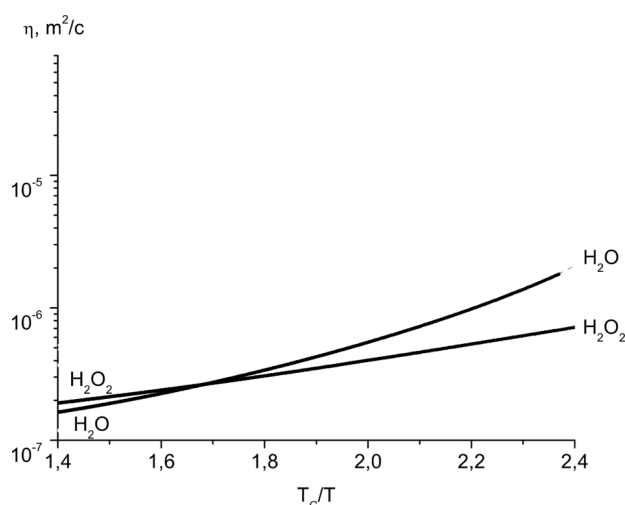


Рис. 5. Температурні залежності логарифма зсувної в'язкості для води та перекису водню

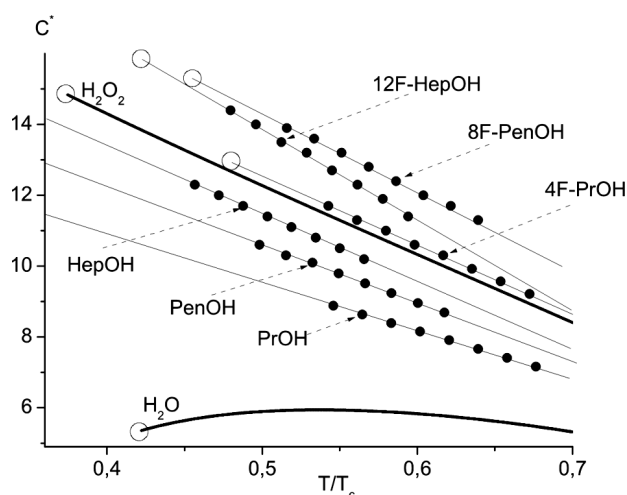


Рис. 6. Температурні залежності приведеної швидкості поширення звуку C^* для аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, а також для води та перекису водню

Аналіз рис. 6 показує, що у воді, де існує сітка водневих зв'язків, швидкість поширення звуку C^* є меншою, ніж для граничних аліфатичних спиртів. Швидкість поширення звуку C^* у перекису водню, де існують водневі зв'язки, але немає сітки водневих зв'язків, є більшою, ніж для граничних аліфатичних спиртів, але меншою, ніж у їх фторзаміщених аналогів, що свідчить про вплив водневих зв'язків і особливо наявності сітки водневих зв'язків на швидкість поширення звуку.

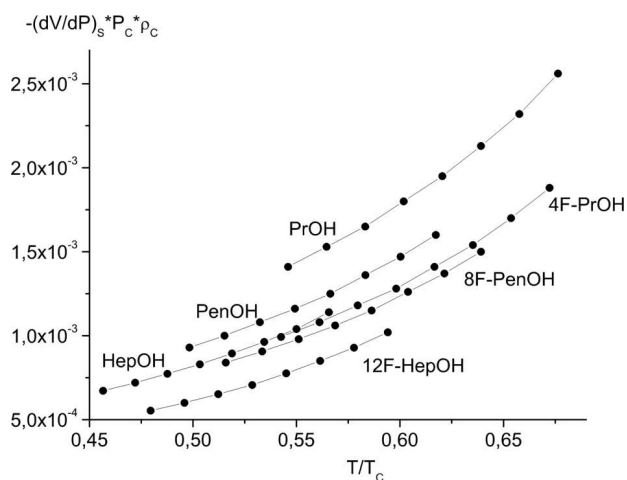


Рис. 7. Температурні залежності приведенного коефіцієнта адіабатичної стисливості аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів

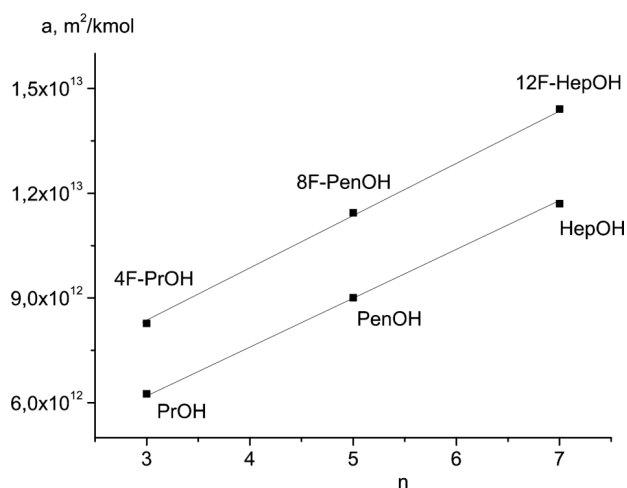


Рис. 8. Залежності параметра міжмолекулярної взаємодії Ван дер Ваальса a від кількості атомів вуглецю n у молекулі для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів

На рис. 7 наведені розраховані температурні залежності приведенного коефіцієнта адіабатичної стисливості $-(\partial V/\partial P)_s \cdot P_c \cdot \rho_c$ для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів.

Аналіз рис. 7 показує, що приведений коефіцієнт адіабатичної стисливості $-(\partial V/\partial P)_s \cdot P_c \cdot \rho_c$ зменшується при переході від граничного аліфатичного спирту до його фторзаміщеного аналогу. Як бачимо, приведений коефіцієнт адіабатичної стисливості зменшується із збільшенням кількості атомів вуглецю у межах гомологічного ряду, як для

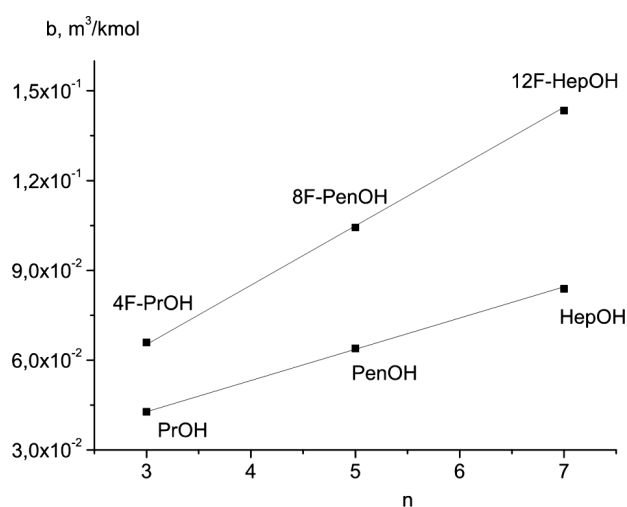


Рис. 9. Залежності параметра міжмолекулярної взаємодії Ван дер Ваальса b від кількості атомів вуглецю n у молекулі для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів

Таблиця 2. Молярна маса (M_r), параметри Ван дер Ваальса (a , b) та параметр ацентричності молекули (w) для аліфатичних спиртів, їх фторзаміщених аналогів, а також для води та перекису водню

Рідина	$M_r \cdot 10^3$, $\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$	$a \cdot 10^{-12}$, $\frac{\text{м}^2}{\text{кмоль}}$	b , $\frac{\text{м}^3}{\text{кмоль}}$	w	Джерело
PrOH	60,095	6,2585	0,042759	0,567822	[35, 40]
PenOH	88,1482	9,0067	0,063943	0,620963	[35, 40]
HepOH	116,2013	11,701	0,083888	0,687522	[35, 40]
4F-PrOH	132,0569	8,274	0,065908	0,662169	[35]
8F-PenOH	232,0719	11,444	0,104402	0,743963	[35]
12F-HepOH	332,0869	14,413	0,143407	0,808113	[35]
H ₂ O	18,0153	1,7296	0,011522	0,345624	[35, 40]
H ₂ O ₂	34,0147	3,0703	0,017895	0,452743	[35, 40]

фторзаміщених, так і для незаміщених спиртів. Це може бути пов'язано із зменшенням ролі водневих зв'язків при фторзаміщенні аліфатичного спирту, а також при зростанні параметра ацентричності більш довгої молекули спирту.

6. Обговорення

Для встановлення фізичних причин відмінностей між аліфатичними спиртами та їх фторзаміщеними аналогами, було побудовано залежності від кількості атомів вуглецю параметрів Ван дер Ва-

альса **a** та **b**, які входять у кубічні рівняння стану: Ван дер Ваальса, Редліх–Квонга, Соаве–Редліх–Квонга, Пенга–Робінсона та їх модифікацій [39]. Вказані параметри є характеристиками інтенсивності міжмолекулярної взаємодії та забороненого об'єму, і відповідно, пов'язані із енергетичним та ентропійним внесками в тиск системи [41].

Значення параметрів Ван дер Ваальса **a**, **b**, та параметра ацентричності молекули **w** наведено у табл. 2. Значення цих параметрів для аліфатичних спиртів, води та перекису водню було взято з літературних джерел [21–23, 39, 40], а для фторзаміщених аналогів аліфатичних спиртів було отримано симуляцією за допомогою штучних нейронних сіток [35, 36] і представлено у табл. 2.

Залежності параметрів Ван дер Ваальса **a** та **b** від кількості атомів вуглецю для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів наведено на рис. 8 та рис. 9.

Аналіз рис. 8 і рис. 9 вказує на зростання параметрів Ван дер Ваальса **a** та **b** при переході від аліфатичних спиртів до їх фторзаміщених аналогів. Причому, якщо характер зростання параметра **a** є однаковим для обох гомологічних рядів, то для параметра **b** має місце якісно відмінний характер зростання. Для фторзаміщених спиртів із зростанням кількості атомів вуглецю параметр, що характеризує заборонений об'єм у системі, зростає швидше, ніж для незаміщених спиртів. Можна припустити, що це може бути пов'язане із більш щільним взаємним розташуванням молекул внаслідок скручування довгих молекул спирту, що приводить до відповідних змін ентропійного внеску в тиск [41]. На нашу думку, саме параметр **b** може розглядатись як характеристика якісної відмінності різних гомологічних рядів.

7. Висновки

На підставі отриманих експериментальних даних в'язкопружних властивостей для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів, із залученням симуляції штучними нейронними сітками величин критичних параметрів та параметрів Ван дер Ваальса для фторзаміщених спиртів, у статті показано, що гомологічні ряди аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів мають низку фізичних відмінностей.

1. Приведена густина фторзаміщених аліфатичних спиртів, на відміну від граничних аліфати-

чних спиртів, за певної приведеної температури менше 0,68 із зростанням кількості атомів вуглецю спочатку зменшується, а потім зростає. В той час як для незаміщених аліфатичних спиртів приведена густина за такої ж приведеної температури із зростанням кількості атомів вуглецю спочатку зростає, а потім зменшується.

2. Для аліфатичних спиртів та їх фторзаміщених аналогів в околі критичної точки із зростанням кількості атомів вуглецю за певної однакової приведеної температури кінематична в'язкість зменшується. Для аліфатичних спиртів в околі температури замерзання із зростанням кількості атомів вуглецю за певної однакової приведеної температури кінематична в'язкість зменшується, у той час як для їх фторзаміщених аналогів навпаки збільшується.

3. Приведена швидкість поширення звуку, яка обернено пропорційна приведеній густині, внаслідок фторзаміщення аліфатичних спиртів зростає, що, на нашу думку, пов'язане із зменшенням щільності водневих зв'язків у рідині. Зауважимо, що у воді, де існує сітка водневих зв'язків, швидкість поширення звуку є меншою, ніж для граничних аліфатичних спиртів.

4. Коефіцієнт адіабатичний стисливості зменшується при переході від граничного аліфатичного спирту до його фторзаміщеного аналогу, а також зменшується для фторзаміщених і незаміщених спиртів із збільшенням кількості атомів вуглецю.

5. Порівняння властивостей спиртів із властивостями води, в якій є суцільна сітка водневих зв'язків, та властивостями перекису водню, де є водневі зв'язки, але сітка відсутня, показують, що зміна фізичних властивостей при фторзаміщенні пов'язана з кількістю водневих зв'язків на одиницю об'єму.

1. Л.М. Ягупольський. *Ароматичні та гетероциклічні сполуки із фторвмісними замісниками* (Наукова думка, 1988).
2. P. Kirsch. *Modern Fluoroorganic Chemistry: Synthesis, Reactivity, Applications* (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2004).
3. *Current Fluoroorganic Chemistry: New Synthetic Directions, Technologies, Materials, and Biological Applications*. Edited by V.A. Soloshonok, K. Mikami, T. Yamazaki, J.T. Welch, J.F. Honek (American Chemical Society, 2007).
4. S. Bhattacharjya, J. Venkatraman, P. Balaram, A. Kumar. Fluoroalcohols as structure modifiers in peptides and pro-

- teins: Hexafluoroacetone hydrate stabilizes a helical conformation of melittin at low pH. *J. Peptide Research* **54** (2), 100 (1999).
5. D. O'Hagan, C. Schaffrath, S.L. Cobb, J.T.G. Hamilton, C.D. Murphy. Biosynthesis of an organofluorine molecule. *Nature* **416** (6878), 279 (2002).
 6. K. Gast, A. Siemer, D. Zirwer, G. Damaschun. Fluoroalcohol-induced structural changes of proteins: Some aspects of cosolvent-protein interactions. *Europ. Biophys. J.* **30** (4), 273 (2001).
 7. M. Zhang, T. Peyear, I. Patmanidis, D.V. Greathouse, S.J. Marrink, O.S. Andersen, H.I. Ingólfsson. Fluorinated alcohols' effects on lipid bilayer properties. *Biophys. J.* **115** (4), 679 (2018).
 8. L.A. Bulavin, A.M. Getalo, O.P. Rudenko, O.V. Khorolskyi. Influence of fluorination on the physical properties of normal aliphatic alcohols. *Ukr. J. Phys.* **60** (5), 428 (2015).
 9. A.M. Hetalo, O.P. Rudenko, O.V. Khorolskyi, S.O. Samoilenko, L.A. Bulavin. Temperature dependence of the bulk elasticity modulus of aliphatic alcohols and their fluorinated analogs. *Ukr. J. Phys.* **63** (2), 134 (2018).
 10. A.M. Hetalo, O.V. Khorolskyi, S.A. Stetsenko, S.O. Samoilenko, O.S. Svechnikova. Similar behavior of rheological properties and the evaluation of the melting temperatures of fluorinated aliphatic alcohols. *Ukr. J. Phys.* **65** (5), 419 (2020).
 11. L.A. Bulavin, O.V. Khorolskyi. Concentration dependences of macromolecular sizes in aqueous solutions of albumins. *Ukr. J. Phys.* **65** (7), 619 (2020).
 12. L.A. Bulavin, K.V. Cherevko, O.V. Khorolskyi, O.S. Svechnikova, Yu.F. Zabashta. Mechanism of protofibril formation in aqueous collagen solutions. *AIP Advances* **14**, 115116 (2024).
 13. O.V. Khorolskyi. The nature of viscosity of polyvinyl alcohol solutions in dimethyl sulfoxide and water. *Ukr. J. Phys.* **62** (10), 858 (2017).
 14. O.A. Kyzyma, T. Kyrey, M.V. Avdeev, M.V. Korobov, L.A. Bulavin, V.L. Aksenov. Non-reversible solvatochromism N-methyl-2-pyrrolidone/toluene mixed solutions of fullerene C₆₀. *Chem. Phys. Lett.* **556**, 178 (2013).
 15. A. Oleinikova, L. Bulavin, V. Pipich. Critical anomaly of shear viscosity in a mixture with an ionic impurity. *Chem. Phys. Lett.* **278**, 121 (1997).
 16. V.F. Korolovych, A. Erwin, A. Stryutsky, H. Lee, W.T. Heller, V.V. Shevchenko, L.A. Bulavin, V.V. Tsukruk. Thermally responsive hyperbranched poly(ionic liquid)s: Assembly and phase transformations. *Macromolecules* **51** (13), 4923 (2018).
 17. О.П. Руденко, В.С. Сперкач. *Експериментальні методи визначення поглинання звуку в рідинах: методичні рекомендації для студентів фізичних спеціальностей педагогічних університетів* (Полтава, 1992).
 18. Refprop Database, NIST. <https://www.nist.gov/programs-projects/reference-fluid-thermodynamic-and-transport-properties-database-refprop>.
 19. ThermodataEngine Database, NIST. <https://trc.nist.gov/tde.html>.
 20. WTT Database, NIST. <https://wtt-pro.nist.gov/wtt-pro/>.
 21. MiniRefprop Database, NIST. <https://trc.nist.gov/refprop/MINIREF/MINIREF.HTM>.
 22. SRD69 Database, Thermophysical Properties of Fluid Systems, Peter Linstrom (2017), NIST Chemistry WebBook – SRD 69, National Institute of Standards and Technology. (Accessed 2023-04-20, <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>).
 23. 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 CoolProp. *Ind. Eng. Chem. Res.* **53** (6), 2498 (2014).
 24. V. Diky, J.P. O'Connell, J. Abildskov, K. Kroenlein, M. Frenkel. Representation and validation of liquid densities for pure compounds and mixtures. *J. Chem. Eng. Data* **60** (12), 3545 (2015).
 25. J.G. Hayden, J.P. O'Connell. A generalized method for predicting second virial coefficients. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* **14** (3), 209 (1975).
 26. P.M. Kessel'man. Modification of the cell model and the equation of state of liquids. *J. Eng. Phys.* **54**, 50 (1988).
 27. B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell. *The Properties of Gases and Liquids* (McGraw-Hill Professional, 2000) [ISBN: 070116822].
 28. Sh. Wang, H. Xiang, B. Han. The modification and generalization of BWR equation. *Fluid Phase Equilibria* **181** (1–2), 71 (2001).
 29. H.G. Rackett. Equation of state for saturated liquids. *J. Chem. Eng. Data* **15**, 514 (1970).
 30. R.D. Gunn, T. Yamada. A corresponding states correlation of saturated liquid volumes. *AIChE J.* **17**, 1341 (1971).
 31. M.M. Aalto, K.I. Keskinen. Liquid densities at high pressures. *Fluid Phase Equilibria* **166** (2), 183 (1999).
 32. A. Letsou, L.I. Stiel. Viscosity of saturated nonpolar liquids at elevated pressures. *AIChE J.* **19**, 409 (1973).
 33. K.G. Joback, R.C. Reid. Estimation of pure component properties from group contributions. *Chem. Eng. Commun.* **57**, 233 (1987).
 34. R.C. Reid, J.M. Prausnitz, B.E. Poling. *The Properties of Gases and Liquids* (McGraw-Hill, 1987).
 35. MOL-Instincts Database, ChemEssen. [https://www.molinstincts.com/\(0001-iyf6; 0001-ixac, 0000-2izr, 0000-133h, 0000-2dco, 0001-polj, 0001-qd78, 0001-pv4l\)](https://www.molinstincts.com/(0001-iyf6; 0001-ixac, 0000-2izr, 0000-133h, 0000-2dco, 0001-polj, 0001-qd78, 0001-pv4l)).
 36. ChemRTP Database, ChemEssen. [http://www.chemrtp.com/\(XLYOFNOQVPJJNP-UHFFFAOYSA-N; MHAJPDPJQMAIIY-UHFFFAOYSA-N; BDERNNFJNOPAEC-UHFFFAOYSA-N; AMQJEAYHLZJPGS-UHFFFAOYSA-N; BBMCTIGTTCYKF-UHFFFAOYSA-N; NBUKAOOFKZFCGD-UHFFFAOYSA-N; JUGSKHLZINSXPQ-UHFFFAOYSA-N; BYKNGMLDSIEFFG-UHFFFAOYSA-N\)](http://www.chemrtp.com/(XLYOFNOQVPJJNP-UHFFFAOYSA-N; MHAJPDPJQMAIIY-UHFFFAOYSA-N; BDERNNFJNOPAEC-UHFFFAOYSA-N; AMQJEAYHLZJPGS-UHFFFAOYSA-N; BBMCTIGTTCYKF-UHFFFAOYSA-N; NBUKAOOFKZFCGD-UHFFFAOYSA-N; JUGSKHLZINSXPQ-UHFFFAOYSA-N; BYKNGMLDSIEFFG-UHFFFAOYSA-N)).

37. I.I. Novikov. Thermodynamic similarity and prediction of the properties and characteristics of substances and processes. *J. Eng. Phys.* **53**, 1227 (1987).
38. 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].
39. M.Z. Southard, D.W. Green. *Perry's Chemical Engineers' Handbook* (Mcgraw-Hill Education, 2019) [ISBN: 9780071834087].
40. C. Yaws. *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons* (Gulf Professional Publishing, 2014).
41. L.D. Landau, E.M. Lifshitz. *Statistical Physics. Volume 5 in Course of Theoretical Physics* (Elsevier, 1980) [ISBN: 978-0-08-023039-9].

Одержано 25.12.24

L.A. Bulavin, Yu.L. Zabulonov, A.M. Hetalo, L.O. Matyash, S.O. Samoilenko, O.V. Khorolskyi, Ye.G. Rudnikov

COMPARISON BETWEEN VISCOELASTIC PROPERTIES OF ALIPHATIC ALCOHOLS AND THEIR FLUORO-SUBSTITUTED ANALOGS

The viscoelastic properties of liquid aliphatic alcohols (propanol-1, pentanol-1, and heptanol-1) have been compared with the properties of their fluoro-substituted analogs. Experimental data on the density, kinematic viscosity, and sound velocity of the liquids, as well as their critical and van der Waals parameters simulated by artificial neural networks, are used. The comparison of the properties of indicated alcohols with those of water, where there is a continuous network of hydrogen bonds, and hydrogen peroxide, where there are hydrogen bonds, but not their network, shows that the change in the physical properties after the fluoro-substitution is associated with the density of hydrogen bonds in the liquid.

Keywords: fluoro-substitutional alcohols, water, hydrogen peroxide, shear viscosity, sound speed, artificial neural networks.