

Для цитирования:

Тюнина Е.Ю., Баделин В.Г. Взаимосвязь молярных параметров вязкого течения и распространения ультразвука в водных растворах аминокислот. *Иzv. вузов. Химия и хим. технология.* 2016. Т. 59. Вып. 6. С. 64-71.

For citation:

Tyunina E.Yu., Badelin V.G. Relationship between molar parameters of viscous flow and ultrasonic wave propagation in aqueous solutions of amino acids. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2016. V. 59. N 6. P. 64-71.

УДК 532.133:547.466

Е.Ю. Тюнина, В.Г. Баделин

Елена Юрьевна Тюнина (✉), Валентин Георгиевич Баделин

Лаборатория «Термодинамика растворов неэлектролитов и биологически активных веществ», Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, ул. Академическая, 1, Иваново, Российская Федерация, 153045

E-mail: tey@isc-ras.ru (✉), vgb@isc-ras.ru

**ВЗАИМОСВЯЗЬ МОЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ВЯЗКОГО ТЕЧЕНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ
УЛЬТРАЗВУКА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ АМИНОКИСЛОТ**

На основе обобщения экспериментальных данных по плотности, вязкости и скорости ультразвука в водных растворах аминокислот исследованы объемные эффекты в характеристиках процессов переноса импульса и ультразвука. Показана возможность описания температурной и концентрационной зависимостей вязкости и скорости ультразвука в рамках метода рациональных параметров Крестова – Афанасьева для водных растворов аминокислот.

Ключевые слова: вязкость, плотность, скорость ультразвука, молярные параметры, аминокислоты, водные растворы, корреляции

E.Yu. Tyunina, V.G. Badelin

Elena Yu. Tyunina (✉), Valentin G. Badelin

Laboratory of Thermodynamics of Non-Electrolyte Solutions and Active Substances, G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of RAS, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045, Russia

E-mail: tey@isc-ras.ru (✉), vgb@isc-ras.ru

**RELATIONSHIP BETWEEN MOLAR PARAMETERS OF VISCOUS FLOW AND ULTRASONIC
WAVE PROPAGATION IN AQUEOUS SOLUTIONS OF AMINO ACIDS**

Quantitative structure-property relationship (QSPR) correlations have been widely applied in biological active solutes over several decades. Many new descriptors (parameters) have been developed. Of the many parameters reported in literature, it is argued that the volume (constitutional, geometrical, compressibility) properties play an important role in determining the

overall state of proteins consisting of the various amino acids residuals. On basis of experimental data on density, viscosity and ultrasound velocity for aqueous solutions of amino acids, the volume effects in characteristics of impulse transfer and ultrasound wave were studied. The analysis on the correlations between molar parameters of viscosity and ultrasound velocity and molar volume for aqueous solutions of glycine, alanine, aminobutanoic acid, valine, leucine and serine has been carried. It was shown, that the temperature and the concentration dependences of viscosity and ultrasound velocity in the aqueous amino acids solutions may be represented using the molar approach of Krestov-Afanas`ev. An evaluation of the degree of correspondence of the correlation dependences to the experimental data was performed with the minimum distribution dispersion (SD), which was also called the sample standard deviation for regression, and the correlation coefficient (r_{corr}). It was shown that on basis of the correlations obtained, the densities or the molar volumes can be successfully used for the estimation of unknown values of the viscosities and sound speeds for the amino acid solutions.

Key words: viscosity, density, ultrasound velocity, molar parameters, amino acids, aqueous solutions, correlations

Несмотря на известные успехи физико-химии жидкостей, описание их свойств в широком диапазоне параметров состояния встречается значительные затруднения. Особенно велики они при прогнозировании кинетических характеристик, отражающих процессы переноса массы, импульса, энергии (тепловой, ультразвуковой, электромагнитной и т.д.) в жидких системах с различным типом межмолекулярных взаимодействий. В этих условиях анализ существующих подходов и систематизация экспериментальных данных, а также выявление на этой основе новых закономерностей оказываются полезными как для решения ряда прикладных задач, так и для развития строгих подходов в теории жидкого состояния [1-6]. Данная работа является продолжением цикла исследований вязкого течения и объемно-упругих свойств большого числа жидких систем, включая молекулярные жидкости, бинарные растворители, растворы электролитов, расплавы [5-11]. В настоящей работе рассмотрены результаты исследований взаимосвязи вязкости и скорости распространения ультразвука для водных растворов аминокислот. Оба свойства весьма чувствительны к структурным изменениям, происходящим в растворах, хотя и отражают различные особенности межмолекулярных взаимодействий. Их сопоставление дает возможность получить дополнительные сведения о механизме процессов переноса и причинах изменения кинетических коэффициентов при изменении параметров состояния. Термодинамические и транспортные свойства аминокислот в водной среде играют важную роль в оптимизации и дизайне технологических процессов при синтезе лекарственных средств, пищевых до-

бавок. Аминокислоты широко используются в качестве моделей полипептидов и белков для выявления закономерностей их термодинамического поведения в растворах и понимания состояния сольватации биоактивных молекул, что способствует разработке новых подходов для описания сложных биохимических систем.

В работах Г.А. Крестова и В.Н. Афанасьева [1, 12, 13] были изложены основы разработанного ими метода рациональных параметров, позволяющего проводить корректное сравнение разных веществ, и показана целесообразность поиска взаимосвязи между молярными физико-химическими свойствами жидких систем. В качестве таких параметров процессов переноса нами выбраны молярная вязкость (η_m) и молярное время распространения ультразвука (t_m), которые являются физико-химическими показателями, характеризующими 1 моль системы при изменении ее состава или параметров состояния [1, 6]. В настоящей работе данный подход распространен на водные растворы аминокислот (глицина (Gly), аланина (Ala), аминокислоты (Abu), валина (Val), лейцина (Leu), серина (Ser)) при изменении температуры от 278,15 до 308,15 К и концентрации 0,029 – 0,350 моль/кг.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Как было показано [5, 8], уравнение движения моля линейной вязкой жидкости имеет вид:

$$M(dv/dt) = M(f-\nabla P) + \eta V \nabla^2 v + V(\xi - 1/3 \eta) \nabla \operatorname{div} v, \quad (1)$$

где M – молекулярная масса, V – молярный объем (V_m), v – скорость движения, f – «плотность» массовой силы, P – давление, η и ξ – коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости. Два последних

слагаемых определяют диссипацию механической энергии, соответственно, при относительных смещениях слоев и при изменении объема под воздействием внешних сил. Тогда произведение динамической вязкости на мольный объем представляет собой молярную вязкость ($\eta_m = \eta V_m$), которую можно рассматривать как характеристический параметр, определяющий сдвиговую вязкость 1 моля жидкофазной системы при изменении ее параметров состояния. Аналогичный смысл имеет произведение ξV_m и для объемной вязкости. Таким образом, молярная вязкость равна мольному потоку импульса при $\nabla^2 v = 1$. Преимущество использования молярной вязкости показано ранее [3, 4, 7, 8, 10].

Среди акустических свойств особое место занимает молярный параметр скорости распространения ультразвуковой волны [1]. Распространение ультразвука, представляющего собой упругую волну, происходит вдоль линии направления его движения. Время прохождения им расстояния ℓ в объеме V жидкости со скоростью u определяется как $t = \ell/u$, где ℓ можно выразить через объем и площадь поверхности движения волны: $\ell = V/S$. Если объем равен молярному объему жидкости (V_m), а $S = (V_m)^{2/3}$, то параметр t_m для 1 моль вещества запишется в виде [1, 6]:

$$t_m = V_m^{1/3}/u. \quad (2)$$

Таким образом, t_m характеризует время переноса упругой деформации (1) молекул жидкости в направлении распространения звуковой волны [1, 6, 10].

Проведенный анализ жидких систем различной химической природы и обобщение большого экспериментального материала показали, что вязкостные свойства определяются, прежде всего, их объемными характеристиками [3, 4, 7, 8]. В результате было установлено, что молярная текучесть $F_m = 1/\eta V_m$ в широком интервале температур является линейной функцией мольного объема жидкой среды:

$$(F_m - F_0)/F_0 = B(V_m - V_0)/V_0. \quad (3)$$

Уравнение (3) может быть преобразовано к виду:

$$F_m = A' + B' \cdot V_m, \quad (4)$$

где $A' = F_0(1-B)$, $B' = BF_0/V_0$, V_m – мольный объем, V_0 – предельный объем, определяемый соотношением $V_0 = \lim_{F_m \rightarrow 0} V_m$; $F_0 = F_m$ при $(V_m - V_0) = V_0$, B – константа, характерная для каждого вещества. Можно полагать, что величина предельного объема есть мольный объем плотной упаковки молекул вещества при фиксированной температуре T_0 ,

при которой свободный объем, необходимый для перемещения частиц, практически отсутствует. Величина мольного объема V_0 зависит от размеров и формы молекул, тогда как F_0 характеризует молекулярное движение при определенных условиях (T, P, c) и зависит от особенностей межмолекулярного взаимодействия. Коэффициент B находится в зависимости от способности молекулы поглощать передаваемый при вязком течении импульс, что в свою очередь определяется ее массой, гибкостью, твердостью (мягкостью) сферы, свободой вращения и т.д. Хотя данный подход строго справедлив для молекулярных жидкостей без специфического взаимодействия, получены результаты его успешного применения для бинарных растворителей и неводных растворов электролитов [8, 10, 11].

В настоящей работе использованы собственные и литературные данные по плотности [14-19] и вязкости [20-23] водных растворов аминокислот и по соотношениям (5-7) вычислены значения молекулярной массы (M_{cm}), мольного объема (V_m) и молярного параметра вязкости (η_m) растворов аминокислот:

$$M_{cm} = X_2 M_2 + X_1 M_1 \quad (5)$$

$$V_m = M_{cm}/\rho \quad (6)$$

$$\eta_m = \nu M_{cm} = \eta V_m, \quad (7)$$

где $\nu = \eta/\rho$ – кинематическая вязкость раствора, ρ – плотность раствора, X_1 и X_2 – мольные доли растворителя и растворенного вещества, M_1 и M_2 – молекулярные массы растворителя и аминокислоты. На основе обобщения полученных результатов установлено, что в изученных интервалах концентраций и температур соблюдается линейный характер зависимости молярной текучести от мольного объема $F_m = f(V_m)$, представленной в графической форме на рис. 1, 2 для серина и аминокислоты. В табл. 1, 2 приведены значения коэффициентов соотношения (4) для описания влияния концентрации и температуры на вязкое течение исследуемых растворов через объемные свойства. С повышением температуры угол наклона зависимости $F_m(m) = f(V_m(m))$ увеличивается (табл. 1), что обусловлено ростом текучести раствора и его мольного объема. Увеличение концентрации аминокислоты в водном растворе сопровождается повышением вязкости и мольного объема раствора и понижением его текучести, что приводит к уменьшению угла наклона зависимости $F_m(T) = f(V_m(T))$. Следует отметить, что линейный характер уравнения (4) дает возможность оценить вязкостные свойства водных растворов аминокислот по минимальному количеству экспериментальных измерений ρ и ν при разных температурах и концентрациях.

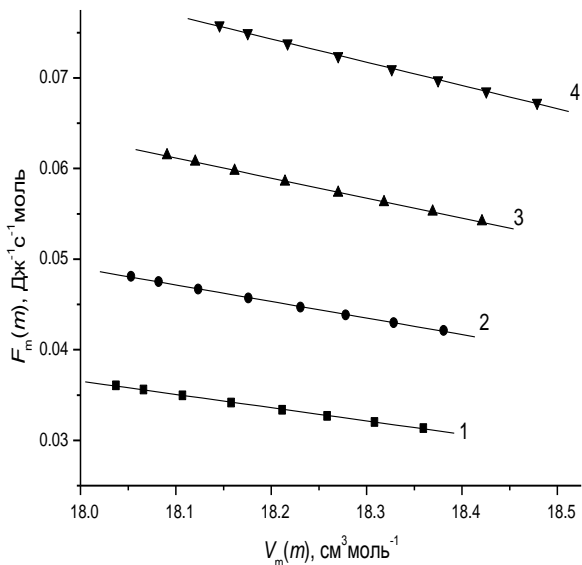


Рис. 1. Изотермы зависимости молярной текучести $F_m(m)$ от молярного объема $V_m(m)$ для водных растворов аминокислоты при температурах, К: 1-278,15; 2-288,15; 3-298,15 и 4-308,15

Fig. 1. Isothermal dependence of molar fluidity $F_m(m)$ on molar volume $V_m(m)$ for aqueous solutions of aminobutyric acid at 1-278.15 K, 2-288.15 K, 3-298.15 K and 4-308.15 K

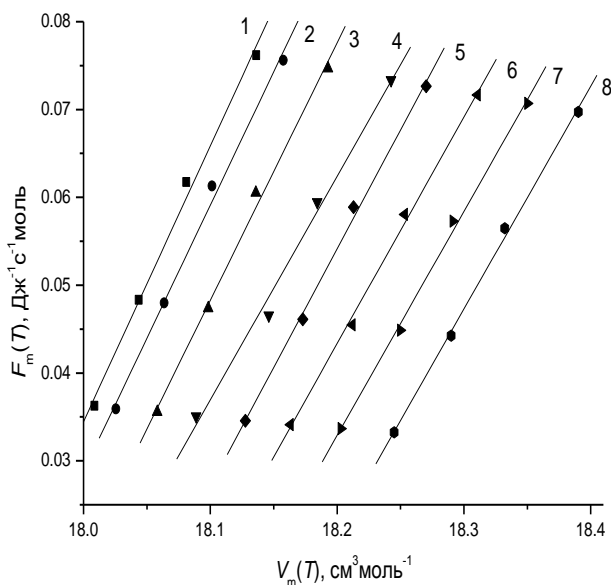


Рис. 2. Изоконцентраты зависимости молярной текучести $F_m(T)$ от молярного объема $V_m(T)$ для водных растворов серина при концентрациях (моль/кг): 1-0,0297; 2-0,0610; 3-0,101; 4-0,0152; 5-0,2001; 6-0,251; 7-0,302; 8-0,353

Fig. 2. Isoconcentration dependences of molar fluidity $F_m(T)$ on molar volume $V_m(T)$ for aqueous solutions of serine at molality (mol/kg): 1-0.0297, 2-0.0610, 3-0.101, 4-0.0152, 5-0.2001, 6-0.251, 7-0.302, 8-0.353

Используя основные представления, развитые в работах Дебая и Френкеля [24], жидкость можно рассматривать в квазикристаллическом приближении [25] и отождествлять с системой колеблющихся гармонических осцилляторов в

вязкой среде. Следует отметить, что реальность подобной модели для жидкостей в первом приближении подтверждается целым рядом экспериментов, в том числе по рассеянию медленных нейтронов [26]. На основе этой модели ранее [6,10] было предложено уравнение взаимосвязи молярных характеристик переноса импульса и распространения ультразвуковых колебаний для широкого круга индивидуальных растворителей и неводных растворов электролитов:

$$t_m = a + b \cdot F_m V_m^{2/3}, \quad (8)$$

где a , b – константы, F_m – молярная текучесть. В настоящей работе подход распространен на водные растворы аминокислот на основе использования экспериментальных значений плотности, вязкости и скорости звука (u) [15, 16, 27, 28].

Таблица 1

Коэффициенты изотермической зависимости $F_m(m) = a + b \cdot V_m(m)$ для водных растворов аминокислот
Table 1. Coefficients of isothermal dependence $F_m(m) = a + b \cdot V_m(m)$ for aqueous amino acids solutions

T, K	a	-b	r_{corr}	$10^5 \sigma$
Gly				
278,15	0,2501±0,0023	0,0118±1,2·10 ⁻⁴	0,9996	1,9
288,15	0,3484±0,0013	0,0166±7,5·10 ⁻⁵	0,9999	1,4
298,15	0,4476±0,0011	0,0213±6,1·10 ⁻⁵	0,9999	1,4
308,15	0,5618±0,0140	0,0267±1,3·10 ⁻³	0,9897	21
Ala				
278,15	0,2943±0,0032	0,0143±1,7·10 ⁻⁴	0,9995	4,0
288,15	0,3746±0,0034	0,0181±1,7·10 ⁻⁴	0,9996	5,3
298,15	0,4650±0,0038	0,0223±2,1·10 ⁻⁴	0,9996	6,0
308,15	0,5554±0,0048	0,0264±2,6·10 ⁻⁴	0,9996	7,6
Abu				
278,15	0,3002±0,0036	0,0146±1,9·10 ⁻⁴	0,9994	6,0
288,15	0,3772±0,0041	0,0182±2,2·10 ⁻⁴	0,9995	7,0
298,15	0,4604±0,0042	0,0220±2,5·10 ⁻⁴	0,9996	8,0
308,15	0,5408±0,0051	0,0256±2,6·10 ⁻⁴	0,9996	8,6
Val				
278,15	0,2978±0,0041	0,0145±2,4·10 ⁻⁴	0,9992	9,5
288,15	0,3661±0,0071	0,0176±4,0·10 ⁻⁴	0,9978	21
298,15	0,4376±0,0040	0,0208±2,4·10 ⁻⁴	0,9994	14
308,15	0,5139±0,0071	0,0241±4,1·10 ⁻⁴	0,9987	22
Leu				
278,15	0,3119±0,0010	0,0153±5,2·10 ⁻⁵	0,9999	0,51
288,15	0,3752±0,0010	0,0181±5,6·10 ⁻⁵	0,9999	0,81
298,15	0,4425±0,0016	0,0211±9,1·10 ⁻⁵	0,9999	0,78
308,15	0,5189±0,0046	0,0244±4,1·10 ⁻⁴	0,9996	2,4
Ser				
278,15	0,2674±0,0019	0,0128±1,1·10 ⁻⁴	0,9997	2,5
288,15	0,3447±0,0028	0,0164±1,6·10 ⁻⁴	0,9996	4,3
298,15	0,4409±0,0029	0,0209±1,6·10 ⁻⁴	0,9997	4,5
308,15	0,5326±0,0041	0,0252±2,1·10 ⁻⁴	0,9997	6,4

Таблица 2

Коэффициенты изоконцентрационной зависимости $F_m(T)=\alpha+\beta \cdot V_m(T)$ для водных растворов аминокислот
 Table 2. Coefficients of isoconcentration dependence $F_m(T)=\alpha+\beta \cdot V_m(T)$ for aqueous amino acids solutions

m, моль/кг	$-\alpha$	β	r_{corr}	$10^3 \sigma$
Gly				
0,0297	7,92±0,56	0,441±0,031	0,9970	2,6
0,0610	7,82±0,53	0,435±0,029	0,9967	2,5
0,1010	8,01±0,50	0,445±0,028	0,9968	2,4
0,1520	7,51±0,46	0,417±0,025	0,9966	2,2
0,2001	7,35±0,43	0,408±0,023	0,9966	2,1
0,2510	7,18±0,40	0,398±0,022	0,9969	1,9
0,3020	7,03±0,37	0,389±0,020	0,9974	1,8
0,3530	6,87±0,35	0,380±0,019	0,9975	1,8
Ala				
0,0299	6,87±0,39	0,383±0,021	0,9968	1,6
0,0597	6,13±0,05	0,342±0,002	0,9995	0,2
0,1005	5,53±0,34	0,308±0,018	0,9965	1,8
0,1513	5,41±0,32	0,301±0,018	0,9966	1,7
0,2024	5,18±0,20	0,287±0,011	0,9985	1,1
0,2425	4,99±0,18	0,276±0,009	0,9988	1,0
0,3001	4,94±0,20	0,273±0,011	0,9984	1,1
0,3527	4,59±0,16	0,253±0,009	0,9987	0,9
Abu				
0,0310	6,39±0,22	0,356±0,012	0,9988	1,0
0,0594	5,84±0,53	0,326±0,029	0,9958	2,0
0,0998	5,54±0,35	0,308±0,019	0,9962	1,8
0,1508	5,51±0,38	0,306±0,021	0,9959	2,0
0,2041	5,10±0,22	0,282±0,012	0,9983	1,2
0,2510	5,18±0,32	0,286±0,016	0,9967	1,7
0,3002	5,01±0,24	0,276±0,013	0,9979	1,0
0,3519	4,93±0,26	0,270±0,014	0,9978	1,4
Val				
0,0305	5,54±0,29	0,309±0,016	0,9978	1,5
0,0558	5,51±0,29	0,307±0,016	0,9975	1,5
0,0997	5,30±0,25	0,294±0,014	0,9978	1,7
0,1473	5,10±0,24	0,283±0,013	0,9978	1,3
0,1939	5,13±0,25	0,283±0,012	0,9977	1,4
0,2526	5,01±0,26	0,275±0,014	0,9975	1,5
0,33385	4,59±0,16	0,251±0,009	0,9988	0,9
Leu				
0,0312	5,52±0,26	0,308±0,016	0,9978	1,5
0,0428	5,49±0,27	0,306±0,015	0,9977	1,4
0,0522	5,42±0,23	0,302±0,012	0,9986	1,2
0,0606	5,48±0,30	0,305±0,016	0,9977	1,5
0,0611	5,30±0,30	0,295±0,017	0,9968	1,7
0,0703	5,27±0,11	0,293±0,006	0,9995	0,6
0,0763	4,77±0,41	0,265±0,023	0,9954	2,5
0,0805	4,60±0,21	0,253±0,012	0,9978	1,4

m, моль/кг	$-\alpha$	β	r_{corr}	$10^3 \sigma$
Ser				
0,0296	5,61±0,31	0,313±0,016	0,9985	1,6
0,0652	5,42±0,26	0,303±0,015	0,9974	1,5
0,1007	5,25±0,25	0,293±0,014	0,9979	1,4
0,1519	4,56±0,28	0,254±0,015	0,9968	1,8
0,2039	4,86±0,18	0,280±0,010	0,9988	1,0
0,2524	4,65±0,17	0,257±0,009	0,9989	1,0
0,3016	4,60±0,14	0,254±0,009	0,9988	1,0
0,3506	4,59±0,14	0,253±0,008	0,9989	0,8

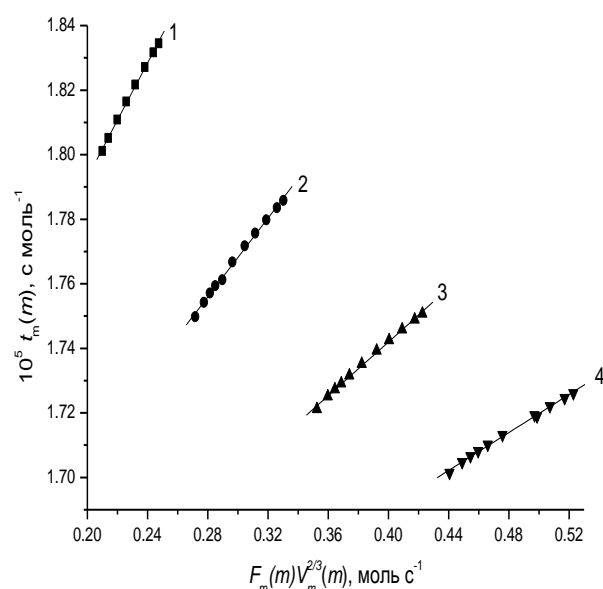


Рис. 3. Изотермы зависимости молярного времени распространения ультразвука $t_m(m)$ от молярного параметра вязкости $F_m(m)V_m^{2/3}(m)$ для водных растворов валина при температурах, К: 1-278,15; 2-288,15; 3-298,15 и 4-308,15

Fig. 3. Isothermal dependences of molar time of the ultrasonic wave propagation $t_m(m)$ on molar parameter of viscosity $F_m(m)V_m^{2/3}(m)$ for aqueous solutions of valine at 1-278.15 K, 2-288.15 K, 3-298.15 K and 4-308.15 K

Концентрационная зависимость t_m для исследуемых растворов аминокислот носит линейный характер. Влияние температуры и концентрации на величину t_m практически одинаково для исследуемых систем и характеризуется изменением величин α и β в одном направлении. На рис. 3, 4 представлены графики зависимости $t_m = f(F_m V_m^{2/3})$ для водных растворов аминокислот, а значения коэффициентов соотношения (8) приведены в табл. 3, 4. Обработка концентрационных $t_m(m) = f(F_m V_m^{2/3}(m))$ и температурных $t_m(T) = f(F_m V_m^{2/3}(T))$ зависимостей методами линейной регрессии показала, что более высокие коэффициенты корреляции и минимальное отклонение от экспериментальных значений наблюдаются при использовании уравнения (8) для описания исследуемых мо-

лярных свойств растворов при изменении концентрации, чем температуры. Полученные результаты открывают возможность оценки скорости ультразвука (u) из вискозиметрических данных с погрешностью 2-5%, что сопоставимо с уровнем оценки физико-химических свойств из корреляционных соотношений (от 5 до 12% [29, 30]).

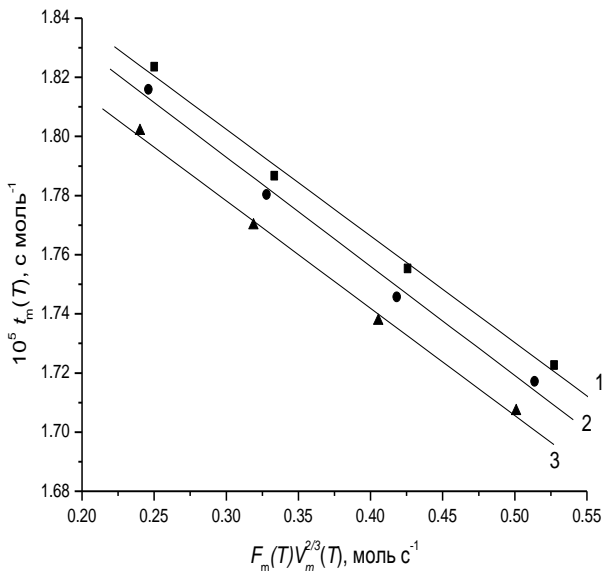


Рис. 4. Изоконцентраты зависимости молярного времени распространения ультразвука $t_m(T)$ от молярного параметра вязкости $F_m(T)V_m^{2/3}(T)$ для водных растворов глицина при концентрациях (моль/кг): 1-0,0297, 2-0,0152, 3-0,353
 Fig. 4. Isoconcentration dependences of molar time of the ultrasonic wave propagation $t_m(T)$ on molar parameter of viscosity $F_m(T)V_m^{2/3}(T)$ for aqueous solutions of glycine at molality (mol/kg): 1-0.0297, 2-0.0152, 3-0.353

Таблица 3

Коэффициенты изотермической зависимости
 $t_m(m)=q+k \cdot F_m(m) \cdot V_m^{2/3}(m)$ для водных растворов аминокислот

Table 3. Coefficients of isothermal dependence
 $t_m(m)=q+k \cdot F_m(m) \cdot V_m^{2/3}(m)$ for aqueous amino acids solutions

T, K	$10^5 q$	$10^5 k$	r_{corr}	$10^9 \sigma$
Gly				
278,15	1,3789±0,0052	1,8280±2,1·10 ⁻³	0,9995	2,3
288,15	1,4007±0,0002	1,1578±6,4·10 ⁻⁴	0,9999	0,1
298,15	1,4277±0,0004	0,7603±1,0·10 ⁻³	0,9999	0,3
308,15	1,4390±0,0123	0,5457±2,3·10 ⁻²	0,9947	8,7
Ala				
278,15	1,5661±0,0020	1,0833±8,2·10 ⁻³	0,9997	1,7
288,15	1,5553±0,0019	0,6969±6,1·10 ⁻³	0,9997	1,9
298,15	1,5508±0,0017	0,4721±4,1·10 ⁻³	0,9997	1,7
308,15	1,5447±0,0014	0,3465±2,6·10 ⁻³	0,9997	1,4
Val				
278,15	1,6148±0,0031	0,8902±1,1·10 ⁻²	0,9992	4,9
288,15	1,5851±0,0031	0,6105±1,0·10 ⁻²	0,9987	6,8

T, K	$10^5 q$	$10^5 k$	r_{corr}	$10^9 \sigma$
298,15	1,5753±0,0022	0,4166±7,0·10 ⁻³	0,9988	5,4
308,15	1,5728±0,0023	0,2939±5,0·10 ⁻³	0,9987	4,4
Leu				
278,15	1,6266±0,0006	0,8406±2,5·10 ⁻³	0,9999	0,2
288,15	1,6029±0,0005	0,5540±1,7·10 ⁻³	0,9999	0,1
298,15	1,5929±0,0006	0,3735±1,4·10 ⁻³	0,9999	0,2
308,15	1,5918±0,0011	0,2571±2,1·10 ⁻³	0,9997	0,3

Таблица 4

Коэффициенты изоконцентрационной зависимости
 $t_m(T)=\gamma+\delta \cdot F_m(T) \cdot V_m^{2/3}(T)$ для водных растворов аминокислот

Table 4. Coefficients of isoconcentration dependence
 $t_m(T)=\gamma+\delta \cdot F_m(T) \cdot V_m^{2/3}(T)$ for aqueous amino acids solutions

m, моль/кг	$10^5 \gamma$	$-10^5 \delta$	r_{corr}	$10^8 \sigma$
Gly				
0,0297	1,906±0,012	0,356±0,032	0,9970	6,2
0,0610	1,907±0,014	0,354±0,033	0,9898	7,4
0,1013	1,910±0,013	0,351±0,032	0,9948	7,1
0,1520	1,897±0,012	0,349±0,031	0,9959	6,2
0,2005	1,893±0,012	0,348±0,030	0,9962	6,2
0,2519	1,891±0,013	0,344±0,034	0,9956	6,9
0,3023	1,888±0,013	0,343±0,032	0,9964	6,9
0,3533	1,884±0,008	0,342±0,021	0,9975	4,5
Ala				
0,0299	1,908±0,011	0,358±0,028	0,9957	5,6
0,0597	1,906±0,013	0,356±0,032	0,9956	7,1
0,1005	1,902±0,013	0,357±0,035	0,9954	7,1
0,1513	1,892±0,010	0,352±0,026	0,9963	5,2
0,2024	1,891±0,012	0,346±0,033	0,9954	6,1
0,2425	1,877±0,008	0,342±0,021	0,9965	4,0
0,3001	1,876±0,009	0,335±0,026	0,9962	5,0
0,3527	1,875±0,012	0,332±0,035	0,9986	5,1
Val				
0,0309	1,892±0,008	0,348±0,020	0,9964	4,1
0,0573	1,891±0,008	0,338±0,022	0,9956	4,5
0,0997	1,890±0,010	0,337±0,024	0,9963	5,5
0,1511	1,888±0,012	0,335±0,033	0,9954	6,8
0,2011	1,876±0,006	0,334±0,016	0,9976	3,4
0,2542	1,872±0,012	0,334±0,032	0,9947	6,5
0,3097	1,865±0,012	0,333±0,035	0,9952	6,0
0,3485	1,855±0,009	0,330±0,026	0,9956	5,3
Leu				
0,0312	1,909±0,013	0,328±0,034	0,9958	6,5
0,0428	1,906±0,014	0,327±0,036	0,9897	7,4
0,0450	1,905±0,012	0,328±0,037	0,9898	7,2
0,0522	1,904±0,015	0,327±0,035	0,9897	7,8
0,0606	1,901±0,012	0,325±0,032	0,9963	6,6
0,0611	1,900±0,011	0,325±0,021	0,9959	5,3
0,0703	1,899±0,011	0,323±0,023	0,9954	6,0
0,0763	1,898±0,011	0,320±0,030	0,9976	6,1

Проведенный анализ результатов исследования взаимосвязи молярного объема, молярных характеристик вязкого течения и скорости распространения ультразвуковой волны (t_m , F_m , V_m) в водных растворах различных аминокислот показал, что физической основой этих соотношений, по-видимому, является схожий характер изменения межмолекулярных взаимодействий при изменении температуры или концентрации аминокислоты в растворе. Отметим, что молекулы исследуемых аминокислот ($H_2NCH(R)COOH$) содержат одинаковые амино- и карбоксильную группы и отличаются лишь алкильным радикалом (-R). В воде аминокислоты существуют преимущественно в виде цвиттерионов [31] и характеризуются присутствием гидрофильных (COO^- , NH_3^+ , OH^-) и

гидрофобного (-R) центров. Их взаимодействие с молекулами воды при изменении параметров состояния (температуры, концентрации) сопровождается определенным изменением объемных свойств растворов аминокислот, что, в свою очередь, влияет на вязкостные и упругие свойства исследуемых систем.

Таким образом, применение разработанных Г.А. Крестовым и В.Н. Афанасьевым молярных параметров для создания корреляционных моделей позволяет более корректно проводить сопоставление разных жидкофазных систем и прогнозировать их физико-химические свойства, исходя из экспериментальных данных по другим свойствам при изменении параметров состояния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Афанасьев В.Н., Крестов Г.А. // Докл. АН СССР. 1983. Т. 269. №3. С. 620-623.
2. Никифоров М.Ю., Альпер Г.А., Крестов Г.А. // Журн. физ. химии. 1988. Т. 62. № 2. С. 561-569.
3. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Крестов Г.А. // Журн. физ. химии. 1993. Т. 67. №3. С. 460-462.
4. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Крестов Г.А. // Журн. физ. химии. 1995. Т. 69. №3. С. 538-541.
5. Afanasyev V.N., Panenko E.S. // ASH-models in chemistry. 1999. V. 136. N1-2. P. 625-630.
6. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Левочкина Г.Н. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1997. Т. 40. Вып. 1. С. 41-45.
7. Тюнина Е.Ю. // Журн. физ. химии. 2014. Т. 88. № 4. С. 557-563.
8. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Зятыкова Л.А. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2000. Т. 43. Вып. 5. С. 96-102.
9. Давыдова О.И., Тюнина Е.Ю., Афанасьев В.Н., Филатов В.А. Внутреннее трение, объемные свойства и скорость распространения ультразвука в системе ацетон-хлороформ разного изотопного состава. М. 35с. Деп. в ВИНТИ 15.04.1991. №1601-B91.
10. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Чекунова М.Д. // Журн. физ. химии. 2006. Т.80. № 12. С. 2167-2171.
11. Афанасьев В.Н., Паненко Е.С. // Журн. физ. химии. 2000. Т. 74. №2. С. 316-323.
12. Афанасьев В.Н., Мерщикова Е.Ю., Крестов Г.А. // Журн. физ. химии. 1984. Т. 58. №8. С. 2067-2070.
13. Афанасьев В.Н., Мерщикова Е.Ю., Крестов Г.А. // Межвуз. сб. «Сольватационные процессы в растворах». Иваново. 1985. С. 3-5.
14. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Рябова В.В. // Журн. физ. химии. 2003. Т. 77. № 7. С. 1200-1205.
15. Афанасьев В.Н., Тюнина Е.Ю., Рябова В.В. // Журн. структ. химии. 2004. Т. 45. № 5. С. 883-888.
16. Kikuchi M., Sakurai M., Nitta K. // J. Chem. Eng. Data. 1995. V. 40. N 4. P. 935-942.
17. Duke M.M., Hakin A.W., McKay R.M., Preuss K.E. // Can. J. Chem. 1994. V. 72. P. 1489-1494.

REFERENCES

1. Afanas'ev V.N., Krestov G.A. // Doklady Akademii Nauk SSSR. 1983. V. 269. N 3. P. 620-623 (in Russian).
2. Nikiforov M.Yu., Alper G.A., Krestov G.A. // Zhurn. Fizich. Khim. 1988. V. 62. N 2. P. 561-569 (in Russian).
3. Afanas'ev V.N., Tyunina E.Yu., Krestov G.A. // Zhurn. Fizich. Khim. 1993. V. 67. N 3. P. 460-462 (in Russian).
4. Afanas'ev V.N., Tyunina E.Yu., Krestov G.A. // Zhurn. Fizich. Khim. 1995. V. 69. N 3. P. 538-541. (in Russian).
5. Afanasyev V.N., Panenko E.S. // ASH-models in chemistry. 1999. V. 136. N 1-2. P. 625-630.
6. Afanas'ev V.N., Tyunina E.Yu., Levochkina G.N. // Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 1997. V. 40. N 1. P. 41-45 (in Russian).
7. Tyunina E.Yu. // Zhurn. Fizich. Khim. 2014. V. 88. N 4. P. 557-563 (in Russian).
8. Afanasyev V.N., Tyunina E.Yu., Zyat'kova L.A. // Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2000. V. 43. N 5. P. 96-102 (in Russian).
9. Davidova O.I., Tyunina E.Yu., Afanasyev V.N., Filatov V.A. Internal friction, volume properties and ultrasound propagation – chloroform system of different isotopic compose. M. 35 p. Dep. in VINITI 15.04.1991. N 1601-B91 (in Russian).
10. Afanasyev V.N., Tyunina E.Yu., Chekunova M.D. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2006. V. 80. N 12. P. 1929-1933.
11. Afanasyev V.N., Panenko E.S. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2000. V. 74. N 2. P. 253-259.
12. Afanasyev V.N., Merchikova E.Yu., Krestov G.A. // Zhurn. Fizich. Khim. 1984. V. 58. N 8. P. 2067-2070 (in Russian)
13. Afanasyev V.N., Merchikova E.Yu., Krestov G.A. // Mezchvuz. Zbornik. "Salvation processes in solutions". Ivanovo. 1985. P. 3-5 (in Russian).
14. Afanasyev V.N., Tyunina E.Yu., Ryabova V.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2003. V. 77. N 7. P. 1074-1078.
15. Afanasyev V.N., Tyunina E.Yu., Ryabova V.V. // Zhurn. Struct. Khim. 2004. V. 45. N 5. P. 838-843.
16. Kikuchi M., Sakurai M., Nitta K. // J. Chem. Eng. Data. 1995. V. 40. N 4. P. 935-942.
17. Duke M.M., Hakin A.W., McKay R.M., Preuss K.E. // Can. J. Chem. 1994. V. 72. P. 1489-1494.

18. **Hakin A.W., Duke M.M., Klassen S.A., McKay R.M., Preuss K.E.**// Can. J. Chem. 1994. V. 72. P. 362-368.
19. **Kharakoz D.P.** // Biophys. Chem. 1989. V. 34. P. 115-125.
20. **Тюнина Е.Ю., Баделин В.Г.** // Журн. общ. химии. 2008. Т. 78. № 6. С. 928-933.
21. **Тюнина Е.Ю., Баделин В.Г.** // Биофизика. 2009. Т. 54. № 5. С. 835-840.
22. **Yan Z., Wang J., Liu W., Lu J.** // Thermochemica Acta. 1999. V. 334. P. 17-27.
23. **Belibagli K.B., Ayranci E.** // J. Solution Chem. 1990. V. 19. P. 867-882.
24. **Френкель Я.И.** Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука. 1975. 592 с.
25. **Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А.** Электрохимия. М.: Химия. 2001. 624 с.
26. **Enderby J.E., Neilson G.W.** // Rep. Prog. Phys. 1981. V. 44. P. 593-605.
27. **Kharakoz D.P.** // J. Phys. Chem. 1991. V. 95. P. 5634-5642.
28. **Millero F.J., Surdo A.L., Shin C.** // J. Phys. Chem. 1978. V. 82. P. 784-792.
29. **Бредшнайдер С.** Свойства газов и жидкостей. М.-Л.: Химия. 1966. 536 с.
30. **Лесникович А.И., Левчик С.В.** Корреляции в современной химии. Минск: Изд-во университетское. 1989. 118 с.
31. **Chemistry and biochemistry of the amino acids.** / Ed. by G.C. Barret. London-N.Y.: Chapman and Hall. 1985. 684 p.
18. **Hakin A.W., Duke M.M., Klassen S.A., McKay R.M., Preuss K.E.**// Can. J. Chem. 1994. V. 72. P. 362-368.
19. **Kharakoz D.P.** // Biophys. Chem. 1989. V. 34. P. 115-125.
20. **Tyunina E.Yu., Badelin V.G.** // Russ. J. Gen. Chem. 2008. V. 78. N 6. P. 1155-1160.
21. **Tyunina E.Yu., Badelin V.G.** // Biofizika. 2009. V. 54. N 5. P. 835-840 (in Russian).
22. **Yan Z., Wang J., Liu W., Lu J.** // Thermochemica Acta. 1999. V. 334. P. 17-27.
23. **Belibagli K.B., Ayranci E.** // J. Solution Chem. 1990. V. 19. P. 867-882.
24. **Frenkel Ya.I.** Kinetic theory of liquids. L.: Nauka. 1975. 592 p. (in Russian).
25. **Damaskin B.B., Petriy O.A., Zcirlina G.A.** Electrochemistry. M.: Khimiya. 2001. 624 p. (in Russian).
26. **Enderby J.E., Neilson G.W.** // Rep. Prog. Phys. 1981. V. 44. P. 593-605.
27. **Kharakoz D.P.** // J. Phys. Chem. 1991. V. 95. P. 5634-5642.
28. **Millero F.J., Surdo A.L., Shin C.** // J. Phys. Chem. 1978. V. 82. P. 784-792.
29. **Brettschneider S.** Properties of Gases and Liquids. M.-L.: Khimiya. 1966. 536 p. (in Russian)
30. **Lesnikovich A.I., Levchik S.V.** Correlations in modern chemistry. Minsk: Universitetskoe. 1989. 118 p. (in Russian).
31. **Chemistry and biochemistry of the amino acids.** / Ed. by G.C. Barret. London-N.Y.: Chapman and Hall. 1985. 684 p.

*Поступила в редакцию 09.03.2016
Принята к опубликованию 06.05.2016*

*Received 09.03.2016
Accepted 06.05.2016*