

TALLINNA TEHNIKAÜLIKOOL

Keemiatehnika instituut

Keemiatehnika õppetool

**FENOOLSETE ÜHENDITE STRUKTUURI MÕJU
NENDE PINDPINEVUSELE**

Magistritöö

Mihkel Palu KAKM122088
KAT70LT

Juhendaja: Oliver Järvik, keemiatehnika õppetool, vanemteadur

Tallinn

2015

Autorideklaratsioon

Deklareerin, et käesolev magistritöö, mis on minu iseseisva töö tulemus, on esitatud Tallinna Tehnikaülikooli magistrikraadi taotlemiseks ja et selle alusel ei ole varem taotletud akadeemilist kraadi.

Kõik töö koostamisel kasutatud teiste autorite tööd, olulised seisukohad, kirjandusallikatest ja mujalt pärinevad andmed on viidatud või (avaldamata tööde korral) toodud autorlus välja põhitekstis.

Mihkel Palu

(kuupäev)

(allkiri)

Sisukord

1. Sissejuhatus.....	8
2. Teoreetiline osa.....	9
2.1 Pindpinevus	9
2.2 Pindpinevuse mõõtmismeetodid.....	10
Rippuva tilga meetod	10
Teised mõõtmismeetodid	11
2.3 Pindpinevuse arvutusmeetodid	13
Vedelik – gaasi pindpinevuse arvutusvalem süsivesiknike jaoks	14
Pindpinevuse arvutamine segudes	14
Pindpinevuse arvutamine vesilahustes.....	14
Parakoor	14
2.4 Benseeni derivaatide pindpinevus	16
Alküülbenseenid	16
OH- rühma sisaldavad ained	19
Alküülbenseenide ja OH-rühma sisaldavate ühendite pindpinevuste võrdlus.....	22
3. Eksperimentaalne osa.....	24
3.1 Mõõtemetoodika.....	24
Mõõtmismeetod	24
Seade	24
Arvutuskäik.....	26
3.2 Mõõtetäpsus.....	28
Vesi	29
O-ksüleen	30
Tolueen	31
Klorobenseen	32
Heptaan	33
Hinnang mõõtetäpsusele	34
3.3 Uuritud fenoolid	37
Fenool	38

2,3-ksüleenool ja 2,6-ksüleenool	40
4-Etüülfenool	42
2,4-ditertamüülfenool.....	44
Eksperimentaalsete andmete kokkuvõte ja parakoori hinnang	45
4. Kokkuvõte.....	48
5. Abstract	49
6. Lisa.....	50
6.1 Mõõtmisprotseduur.....	50
6.2 Lisatabelid ja -joonised.....	52
7. Kasutatud kirjandus	59

Joonised

Joonis 1. Vaadeldavad suurused rippuva tilga meetodil	11
Joonis 2. Alküülbenseenide pindpinevuse sõltuvus molaarmassist	17
Joonis 3. Orto-, meta - ja paraasendi pindpinevused.....	18
Joonis 4. Alküülbenseenide pindpinevused sõltuvus kõrvalahela süsiniku arvust	18
Joonis 5. Ühe OH-rühmaga benseeni derivaadid (Jasper, 1972)	19
Joonis 6. Kahe hapnikku sisaldava kõrvalrühmaga benseeni derivaadid (Jasper, 1972).....	20
Joonis 7. OH-rühmaga ainete pindpinevuse sõltuvus molaarmassist.....	21
Joonis 8. OH-rühmaga ainete pindpinevuse sõltuvus süsinike arvust kõrvalahelas	22
Joonis 9. OH-rühma mõju pindpinevusele (Jasper, 1972)	22
Joonis 10. Ksüleenide ja ksüleenoolide pindpinevuse võrdlus (Jasper, 1972)	23
Joonis 11. Ramê-Hart mudel 260 koos modifikatsioonidega	25
Joonis 12. Kambri lisasein	25
Joonis 13. Kambri lisasein	26
Joonis 14. Olulised parameetrid uuritava tilga sees	27
Joonis 15. Diameetrite D_E ja D_S asukohad tilgas	27
Joonis 16. Katseliselt saadud vee ja kirjanduses avaldatud (Vargaftik et al., 1983) pindpinevuse võrdlus.....	29

Joonis 17. O-ksüleeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Chen et al, 2007 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus	30
Joonis 18. Tolueeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Kahl et. al., 2003 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus	31
Joonis 19. Klorobenseeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Kremann et al., 1914, Körösi ja Kovats, 1981 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus	32
Joonis 20. Heptaani katseline ja kirjanduses avaldatud (Queimada et. al., 2003, Jasper et al., 1953, McLure et.al., 1982 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus.....	33
Joonis 21. Katselised tulemused võrdlusainetele	34
Joonis 22. Mõõdetud ja kirjandusest leitud võrdluasainete pindpinevuste erinevused 30 ja 60 °C juures	36
Joonis 23. Katseliselt saadud fenooli ja kirjanduses avaldatud (Buehler, 1932, Badachhope et al. nagu on refereerinud Jasper 1972 ja Jaeger nagu on refereerinud Jasper 1972) pindpinevuste väärtuste võrdlus	38
Joonis 24. Katseliselt saadud 2,3-ksüleenooli ja 2,6-ksüleenooli võrdlus kirjanduse (Jasper, 1972) andmetega.....	40
Joonis 25. Katseliselt saadud etüülfenooli ja kirjanduses antud etüülbenseeni pindpinevuste võrdlus	42
Joonis 26. Katseliselt saadud 2,4-ditertamüülfenooli pindpinevus	44
Joonis 27. Mõõtmistel saadud fenoolsete ühendite pindpinevused.....	45
Joonis 28. Parakoori sõltuvus molaarmassist	47
Joonis 29. Kuumutatav süstal.....	51
Joonis 30. Süstal toatemperatuuril vedelate proovide jaoks.....	52

Tabelid

Tabel 1. Mõõtemetodite koondtabel.....	13
Tabel 2. Aatomite ja gruppide parakooride väärtused (Goel, 2006).....	15
Tabel 3. Erinevate ainete struktuuri järgi leitud parakooride väärtused (Goel, 2006).....	15
Tabel 4. Alküülbenseenide sirgete tegurid ja molaarmassid (Jasper, 1972)	16
Tabel 5. OH-rühmaga ainete pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldavate sirgevõrrandite tegurid ja molekuli iseloomustavad suurused (J Jasper, 1972)	20

Tabel 6. Vee katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus.....	29
Tabel 7. O-ksüleeni katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus.....	30
Tabel 8. Tolueeni katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus.....	31
Tabel 9. Klorobenseen katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus.....	32
Tabel 10. Heptaani katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus.....	33
Tabel 11. Võrdlusainete mõõdetud sirgete tõusud (b) ja algordinaadid (a) võrreldes kirjanduse andmetega.....	36
Tabel 12. Uuritud fenooliühendid	37
Tabel 13 Fenoolsete ühendite tiheduse sõltuvus temperatuurist	38
Tabel 14. Katseliselt saadud ja kirjanduses avaldatud andmetest leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid fenoolile.....	39
Tabel 15. Katseliselt saadud ja parakooride väärtuste kaudu leitud fenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid.....	40
Tabel 16. Katseliselt saadud ja kirjanduses avaldatud andmetest leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid ksüleenoolidele.....	41
Tabel 17. Katseliselt saadud ja parakooride väärtuste kaudu leitud 2,6-ksüleenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid	42
Tabel 18. Katseliselt saadud ja parakooride väärtuste kaudu leitud 2,3-ksüleenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid	42
Tabel 19. Katseliselt saadud 4-etüülfenooli ja kirjanduses antud etüülbenseeni tõusunurgad ja algordinaadid.....	43

Tabel 20. Katseliselt saadud ja parakoorida väärtuste kaudu leitud 4-etüülfenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid	43
Tabel 21. Katseliselt saadud ja parakoorida väärtuste kaudu leitud 2,4-diamüülfenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid.....	45
Tabel 22. Erinevate ainegruppide tõusunurgad ja algordinaadid	47
Tabel 23. Vee katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus.....	52
Tabel 24. Erinevus katseliselt saadud vee pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel.....	53
Tabel 25. O-ksüleeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus	53
Tabel 26. Erinevus katseliselt saadud o-ksüleeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel	53
Tabel 27. Tolueeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus.....	54
Tabel 28. Erinevus katseliselt saadud tolueeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel	54
Tabel 29. .Klorobenseeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus.....	54
Tabel 30. Erinevus katseliselt saadud klorobenseeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel.....	55
Tabel 31. Heptaani katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus.....	55
Tabel 32. Erinevus katseliselt saadud heptaani pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel.....	55
Tabel 33. Katseliselt saadud fenooli pindpinevused	56
Tabel 34. Katseliselt saadud 2,6-dimetüülfenooli pindpinevused.....	56
Tabel 35. Katseliselt saadud 2,3-dimetüülfenooli pindpinevused.....	56
Tabel 36. Katseliselt saadud 4-etüülfenooli pindpinevused.....	57
Tabel 37. Katseliselt saadud 2,4-ditertamüülfenooli pindpinevused	57
Tabel 38. Katselise ja kirjanduslike andmete o-ksüleeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures	57
Tabel 39. Katselise ja kirjanduslike andmete klorobenseeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures	58
Tabel 40. Katselise ja kirjanduslike andmete tolueeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures	58
Tabel 41. Katselise ja kirjanduslike andmete heptaani parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures	58

1. Sissejuhatus

Pindpinevus on vedeliku omadus, mis näitab selle võimet osutada vastupanu välistele jõududele. Pindpinevus on defineeritud kui energia ja jõud. Pindpinevusel kaks enamkasutatavat ühikut – N/m ja J/m². Pindpinevus on oluline näiteks molekulide transpordil üle faasi piirpindade aine massist pindmisesse kihti ning samuti molekuli transpordil ühe faasi piirdes. Pindpinevust kasutatakse vedeliku hoidlate tehnilistes arvutustes ning gaas-vedelik separeerimisel kasutatavate destillatsiooni- ning absorptsioonikolonni disainimisel. Samuti on pindpinevuse oluline reostuse leviku ja mõju hindamisel keskkonnas.

Käesolevas töös antakse ülevaade alküülbenseenide ning ühe -ja kahealuseliste fenoolide pindpinevustest, mida Eesti kukersiitsest põlevkivist toodetud õli sisaldab. Antud töö eesmärgiks oli uurida OH-rühmade mõju benseenituuma sisaldavate ainete pindpinevusele. Kuna eksperimentaalsed andmed fenoolide pindpinevuste kohta on ebapiisavad, siis eksperimendis osas mõõdeti erinevate fenoolide pindpinevuste sõltuvust temperatuurist. Katsed viidi läbi fenooli, 4-etüülfenooli, 2,4-ditertamüülfenooli, 2,6-dimetüülfenooli ja 2,3-dimetüülfenooliga. Pindpinevuse täpsuse hindamiseks kasutati võrdlusainetena vett, o-ksüleeni, klorobenseeni, tolueni ja heptaani. Katsed viidi läbi seadmega Ramê–Hart mudel 260, kusjuures mõõtmiste ajaks tekitati kambrisse lämmastiku keskkond. Pindpinevuse määramiseks kasutati rippuva tilga meetodit ja fenooliühendite mõõtmised viidi läbi temperatuurivahemikus 293,65 K kuni 417,35 K (26,5 °C kuni 144,2 °C).

2. Teoreetiline osa

Käesoleva töö eesmärgiks oli uurida OH-rühmade mõju benseenituuma sisaldavate ainete pindpinevusele – kuidas see sõltub temperatuurist, aine tihedusest, aine struktuurist ja süsinikuahela pikkusest. Teoreetilises osas antakse ülevaade pindpinevuse olulisusest, määramismeetoditest ning kirjanduses alküülbenseenide, ühe- ja kahealuseliste fenoolide kohta leiduvatest pindpinevuse andmetest.

2.1 Pindpinevus

Pindpinevus on keemiatööstuses oluline omadus, kuna ta mõjutab nii ekstraktsiooni-, adsorptsiooni- kui ka katalüüsiprotsess. Pindpinevuse teadmine võimaldab valida protsessides läbiviimiseks sobivaimat ainet lähtuvalt aine võimest käituda märguvalt või mittemärguvalt ja hinnata võimaliku tekkiva vahu takistuse suurust. Ainete valikus on pindpinevus oluline, kuna omadusele tuginedes on võimalik määrata märguvat ning mittemärguvat ühendit. Ainete märgumine on üks aluseid neis kolmes protsessis. Samuti kasutatakse pindpinevust ka gaas-vedelik separeerimisel destillatsiooni- ning absorptsioonikolonni disainimisel. Tuginedes põhja ja – tipuproduktide pindpinevuse erinevusele, on võimalik kindlaks teha, kas destillatsiooni - või absorptsioonikolonnis tekib ainete eraldamisel vahtu või mitte. Vahu tekkimine separatsiooniprotsessides põhjustab probleeme vedeliku ja gaasi eraldamisel. Lisaks mõjutab vedeliku pindpinevus gaasi viibeaega nimetatud seadmetes ja protsessides. Gaasi viibeaega on võimalik arvutada näiteks Akita ja Yoshida, Hikita ja Kikukawa ning Hugmarki võrranditega (valemid 2.1, 2.2 ja 2.3):

$$\text{Akita ja Yoshida valem: } \frac{\varepsilon_g}{1-\varepsilon_g} = C_1 * N_{Bo}^{0,125} N_{Ga}^{0,5} N_{Fr} \quad (2.1)$$

kus $N_{Bo} = \frac{g * D^2 * \rho_l}{\gamma}$ on Bondi arv, $N_{Ga} = \frac{g * D^3}{v_L^2}$ on Galileo arv ja $N_{Fr} = \frac{v_L}{\sqrt{g * D}}$ on Frode arv.

$$\text{Hikita ja Kikukawa võrrand: } \varepsilon_g = 0,505 V_G^{0,47} \left(\frac{72}{\gamma}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{1}{\mu}\right)^{0,05} \quad \text{ja} \quad (2.2)$$

$$\text{Hughmarki võrrand: } \varepsilon_g = \frac{V_G}{V_L} \left(\frac{6 \cdot 24 \cdot 72}{\rho_l * \gamma}\right)^{\frac{1}{3}} \quad , \quad (2.3)$$

kus ε_g on gaasi viibimisaeg kolonnis (s), V_G on gaasi liikumiskiirus m/s, V_L on vedeliku voolamiskiirus (m/s), ρ_L on vedeliku tihedus (g/cm³), γ on pindpinevus (mN/m), D on kolonni diameeter (cm), C_1 on konstant (0,2 mitteelektrolüütidele, 0,25 elektrolyütidele), ν on kinemaatiline viskoossus (cSt), g on raskuskiirendus (m/s²) ja μ on vedeliku dünaamiline viskoossuskoeffitsient (cP).

Pindpinevust grupeeritakse ka transpordiomaduste alla, kuigi see erineb teistest peamistest transpordi omadustest üsna palju. Pindpinevus leiab kasutust õli leviku kiiruse arvutamisel meres õlireostuse puhul. (Riazi, 2005)

2.2 Pindpinevuse mõõtimismeetodid

Rippuva tilga meetod

Rippuva tilga meetodiga, mida kasutati ka käesolevas töös eksperimentaalsete andmete saamiseks, pindpinevuse mõõtmise eeldusteks on, et :

- tilk on sümmeetriline teda läbiva vertikaalse telje suhtes
- tilk on paigal ning ei vibreeri
- ainsad jõud, mis tilgale mõjuvad on pindpinevus ja raskusjõud

Rippuva tilga meetodil pindpinevuse mõõtmisel tekitatakse nõela otsa uuritava aine rippuv tilk. Nõelast väljuv tilk võtab pisara kuju, kuna on raskem kui seda ümbritsev keskkond. Rippuva tilga meetodi kasutamisel pindpinevuse mõõtmiseks on vaja teada uuritava aine ja ümbritseva keskkonna tiheduse sõltuvust temperatuurist. Lähtuvalt tilga mõõtmetest ja kujust, arvutatakse pindpinevus järgneva võrrandiga (<http://www.firsttenangstroms.com/pdffdocs/STPaper.pdf>, 16.04.2015).

$$\gamma = \frac{\Delta p * g * \frac{R_0^2}{1000}}{\beta} * 1000 \quad (2.4)$$

γ on pindpinevus, mN/m,

R_0 on tilga raadius, m,

Δp on faaside vaheline rõhkude erinevus, kg/m³,

g on raskuskiirendus, m/s^2 ,

β on kujutegur.

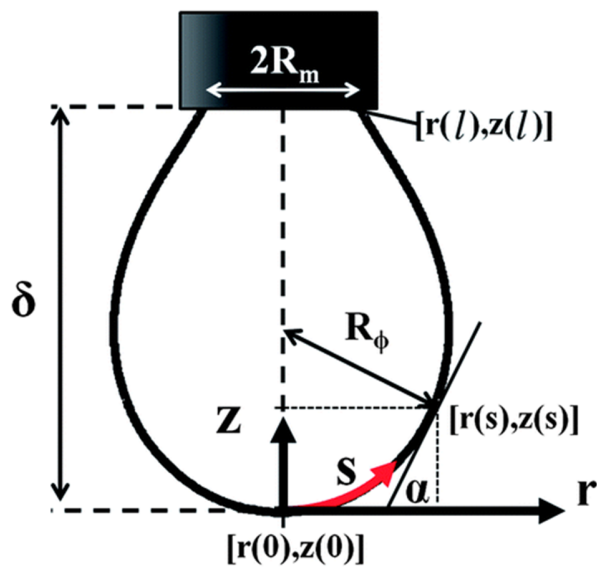
Rippuva tilga meetod põhineb Young-Laplace võrrandil:

$$\Delta p = \gamma * \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right), \text{ kus} \quad (2.5)$$

Δp on faaside vaheline rõhkude erinevus, kg/m^3

γ on pindpinevus, mN/m

r_1 ja r_2 on raadiused tilga sees, m (joonisel 1 näidatud kui R_ϕ ja R_m)



Joonis 1. Vaadeldavad suurused rippuva tilga meetodil

(http://pubs.rsc.org/services/images/RSCpubs.ePlatform.Service.FreeContent.ImageService.svc/ImageService/Articleimage/2014/SM/c3sm51943k/c3sm51943k-f4_hi-res.gif, 08.04.2015)

Teised mõõtmismeetodid

- Du Noüy ringi meetod – traditsiooniline meetod. Selle meetodi eeliseks on asjaolu, et pinna märgumine ei mõjuta mõõtmise täpsust. Mõõtmiseks kasutatakse plaatinast ringi kujulist keha, mis lastakse mõõtetava pinna pealmisesse kihti.

(http://www.nikhef.nl/~h73/kn1c/praktikum/phywe/LEP/Experim/1_4_05.pdf, 16.03.2012)

- Du Noüy–Padday meetod – lihtsam versioon Du Noüy ringi meetodist. Plaattina ringi asemel sukeldatakse mõõtmiseks pinnakihti väikse diameetriga metallnõel. Eeliseks ringi meetodi ees on see, et metallnõela tundlikkus on oluliselt suurem, kui plaattina ringil. Samuti on võimalik selle meetodi abil mõõta väga väikeseid koguseid suure täpsusega ilma, et oleks tarvis muuta mõõtekeha ujuvust. Mõõtmismeetod on kiire, minimaalselt 20 sekundit. (Padday, Pitt ja Pashley, 1974)
- Wilhelmy plaadimeetod – tegu on universaalse meetodiga, mis sobib hästi pindpinevuse intervallseks mõõtmiseks. Selle meetodiga on võimalik määrata ka märguvust. Wilhelmy plaadimeetodit loetakse üsna täpseks pindpinevus mõõtemetodiks, kuna erinevalt Du Noüy meetodist mõõtmiste ajal plaati ei liigutata. (Langmuir ja Blodgett, 2007)
- Pöörleva tilga meetod – see meetod on tehniliselt ideaalne väikeste pindpinevuse mõõtmiseks, seetõttu on meetod eelistatud ülimadalate ($<10^{-2}$ mN/m) pindpinevuste mõõtmiseks. Tilga diameeter mõõdetakse raskemas faasis samal ajal kui mõlemad faasid pöörlevad. (Langmuir ja Blodgett, 2007)
- Mulli rõhu meetod (Jaegeri meetod) – mõõtmismeetod lühiajaliselt koos püsivate pindade (mullide) pindpinevuse määramiseks. Meetodi käigus mõõdetakse maksimaalset rõhku igale mullile eraldi. (Adamson ja Gast, 1997)
- Tilga mahu meetod – vedeliku pindpinevuse määramise meetod, kus ühe tihedusega vedelik pumbatakse teise tihedusega vedeliku sisse ning mõõdetakse aega tilkade tekkimiseks. ([http://lauda.de/hosting/lauda/webres.nsf/urlnames/graphics_tvt2/\\$file/Tensio-dyn-meth-e.pdf](http://lauda.de/hosting/lauda/webres.nsf/urlnames/graphics_tvt2/$file/Tensio-dyn-meth-e.pdf), 20.03.2012)
- Kapillaarse tõusu meetod – kapillaari ots sukeldatakse lahusesse. Selle meetodi täpsus on enamike vedelike puhul 0,1 mN/m. Kõrgus, milleni lahus kapillaaris kerkib, on seotud pindpinevusega valemi (2.6) abil:

$$\gamma = \frac{0,5g \cdot \Delta H \cdot \rho_{liq} - \rho_{air}}{\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}} \quad (2.6)$$

(<http://web.mst.edu/~gbert/SurfaceTension/back.htm>, 30.04.2015)

- Stalagmomeetriline meetod – üks enim kasutatud meetoditest, mis põhineb tilga massi mõõtmisel, teades kapillaari raadiust.

$$\gamma = \frac{W}{2\pi r}, \text{ kus } W \text{ on tilga mass ja } r \text{ on kapillaari raadius} \quad (2.7)$$

(<http://zsm.umcs.lublin.pl/Wyklad/FGF-Ang/2A.F.G.F.%20Surface%20tension.pdf>,

30.04.2015)

Tabel 1. Mõõtemetodite koondtabel

Meetod	Head	Puudused
Rippuva tilga meetod	Täpne ja küllaltki lihtne universiaalne mõõtemetod	Seadme komplekt on kallis
Du Noüy ringi meetod	Pinna märgumine ei mõjuta mõõtmise täpsust	Madal täpsus, kuna plaattinast ringi tundlikkus on väike
Du Noüy–Padday meetod	Mõõtemetod on küllaltki täpne ja vajab väikest proovi kogust ning on kiire	Meetodiga ei saa määrata piirpindade vahelisi jõude vedelike segus
Wilhelmy plaadimeetod	Loetakse täpseks pindpinevus mõõtemetodiks	Plaadipindade vähese homogeensuse tõttu on katsetel saadud tulemuste korduvus madal
Pöörleva tilga meetod	Sobib madalate pindpinevuste mõõtmiseks	Ei sobi kõrgete pindpinevuste mõõtmiseks
Jaegeri meetod	Meetod on kasutaja jaoks lihtne	Ei sobi ebapuhaste ainete mõõtmiseks
Tilga mahu meetod	Sobib mõõtmiseks nii gaasvedelik faasis kui ka vedelikvedelik faasis	Ei sobi väga lähedaste tihedustega ainete mõõtmiseks
Kapillaarse tõusu meetod	Meetodi täpsus on enamike vedelike puhul 0,1 mN/m	Meetod vajab suurt proovi kogust
Stalagmomeetriline meetod	Meetod on lihtne	Mõõtmine on aega nõudev

2.3 Pindpinevuse arvutusmeetodid

Pindpinevust on võimalik arvutada tuginedes Hanseni lahustuvuse parameetritele ja kasutades Beerboweri võrrandit 2.8:

$$\gamma = 0,0715V^{\frac{1}{3}}[\delta_D^2 + 0,632(\delta_P^2 + \delta_H^2)], \quad (2.8)$$

kus γ on pindpinevus, δ_D on mittepolaarse aatomi energia tihedus või lahustuvustegur, mis sõltub hajutatusest, δ_P on alaline dipool–dipool energia tihedus või lahustuvustegur, mis sõltub dipool jõust, δ_H on vesiniku sidumise energia tihedus või lahustuvustegur, mis sõltub vesiniku sidumisest. (C. M. Hansen, 2007)

Vedelik – gaasi pindpinevuse arvutusvalem süsivesiknike jaoks

Süsivesinikest koosneva vedeliku ja õhu vahelist pindpinevust on võimalik määrata võrrandiga 2.9:

$$\gamma = \left[\sum_j P_j * \left(x_j * \frac{\rho_L}{M_L} - y_j * \frac{\rho_G}{M_G} \right) \right]^4, \quad (2.9)$$

kus ρ_L on vedeliku tihedus ja M_L vedeliku molaarmass ning ρ_G gaasi tihedus ja M_G gaasi molaarmass, P on parakoor, x_j on vedeliku moolosa koostises ja y_j on gaasi moolosa koostises. (W. D. McCain, 1990)

Pindpinevuse arvutamine segudes

Segude jaoks saab arvutada pindpinevust Macleod- Sugdeoni võrrandiga 2.10:

$$\gamma_m = [P_{Lm} * \rho_{Lm} - P_{Vm} * \rho_{Vm}]^n, \quad (2.10)$$

kus P_{Lm} on vedeliku segu parakoor, ρ_{Lm} on vedeliku segu tihedus, n on konstant ($n=4$), P_{Vm} on gaasisegu parakoor ja ρ_{Vm} on gaasisegu tihedus. (B. E. Poling, J. M. Prausnitz ja J. P. O'Connell, 2001)

Pindpinevuse arvutamine vesilahustes

Vesilahuste pindpinevust on võimalik arvutada Szyszkowski võrrandi 2.11 abil:

$$\frac{\gamma_m}{\gamma_w} = 1 - 0,411 * \log\left(1 + \frac{x}{a}\right), \quad (2.11)$$

kus γ_w on vee pindpinevus, x on orgaanilise aine moolfraktsioon, a on konstant, mis iseloomustab orgaanilist materjali. (B. E. Poling, J. M. Prausnitz ja J. P. O'Connell, 2001)

Parakoor

Parakoor on suurus, mis on defineeritud võrrandi 2.12 kaudu:

$$P = \frac{M * \gamma^{\frac{1}{4}}}{\rho_l - \rho_g} \Rightarrow \gamma = \left(P * \frac{\rho_l - \rho_g}{M} \right)^4, \quad (2.12)$$

kus M on molaarmass, ρ_l on vedelfaasi tihedus, ρ_g on gaasifaasi tihedus ja γ on lahuse pindpinevus.

Parakoori eripäraks on see, et selle väärtus praktiliselt ei sõltu temperatuurist. Parakoori väärtus muutub 100 °C piires vaid mõni protsent ning temperatuurivahemikus -40–40 °C on parakoori väärtus konstantne. Seega, parakoori kasutamisel võib temperatuuri kui väheolulise teguri arvestamata jätta. Parakoor sõltub kõige enam aine molaarmassist ning samuti ka aines olevatest sidemetest. Parakooride väärtused kasvavad molaarmasside kasvades.

Parakoori saab ka arvutada struktuuri põhisealt. Tabelis 2 on toodud aatomite või struktuuri elementide parakoori väärtused.

Tabel 2. Aatomite ja gruppide parakooride väärtused (Goel, 2006)

Aine/Allikas	Sugden, 1924	Mumford ja Philips, 1929	Vogel, 1948	Quayle, 1953
C	4,8	9,2	8,6	9
H	17,1	15,4	15,7	15,5 10 (OH)
O	20	20	19,8	19,8
kaksikside	23,2	19	19,9	19,1
6-aatomiline ring	6,1	0,8	1,4	0,8
Cl	54,3	55,5	55,2	55,2

Struktuuri põhisealt saadud parakoori väärtused (tabel 3). Fenooli parakoori väärtus näiteks Quayle väärtustele põhinedes on saadud järgmiselt:

$$6 \times 9 + 5 \times 15,5 + 10 + 19,8 + 3 \times 19,1 + 0,8 = 219,4$$

Tabel 3. Erinevate ainete struktuuri järgi leitud parakooride väärtused (Goel, 2006)

Aine/Allikas	Sugden, 1924	Mumford ja Philips, 1929	Vogel, 1948	Quayle, 1953
2,3-Ksüleenool	305,1	305,4	306,7	299,4
2,6-Ksüleenool	305,1	305,4	306,7	299,4
Fenool	227,1	225,4	226,7	219,4
Etüülfenool	305,1	305,4	306,7	299,4
2,4-ditertamüülfenool	617,1	625,4	626,7	619,4
O-ksüleen	285,1	285,4	286,9	285,1
Tolueen	246,1	245,4	246,9	245,1
Klorobenseen	244,3	245,5	246,4	244,8
Heptaan	307,2	310,8	311,4	311

Struktuuri põhiselt saadud parakoori väärtusi saab kasutada ainete pindpinevuste hindamisel, milles pole OH-rühma. Nende ühendite katseliselt saadud pindpinevused ja struktuurilil põhinevad parakoori väärtuse abil arvutatud pindpinevused on suhteliselt sarnased. Erinevused katseliselt ja arvutuslikult saadud pindpinevuste vahel on kuni 2 mN/m (tabelid 38-41). Ühendite, mis sisaldavad OH-rühma, puhul saab väita, et struktuuriliselt saadud parakoori abil arvutatud pindpinevused on indikatiivsed. Sel viisil arvutatud parakooril põhinevad ja katseliselt mõõdetud pindpinevuste vahel on suhteliselt suur (tabelid 15, 17, 18, 20 ja 21).

Antud tulemustele põhinedes saab öelda, et struktuuriliselt saadud parakooril põhinevad arvutuslikult saadud pindpinevusi saab kasutada ainete puhul, mis ei sisalda OH-rühma.

2.4 Benseeni derivaatide pindpinevus

Alküülbenseenid

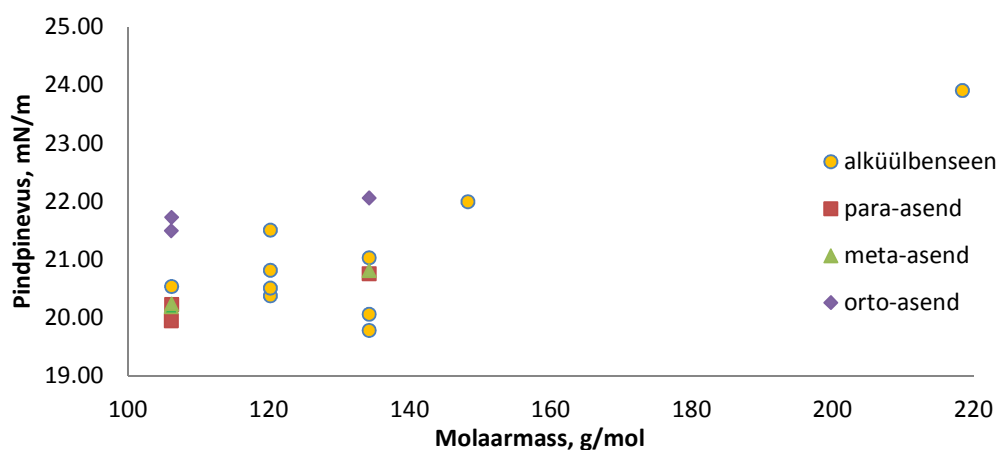
Käesoleva ajani on kõige olulisemaks erinevate puhaste ainete pindpinevuste väärtuste allikaks 1972. aastal Joseph J. Jasperi poolt koostatud ülevaade selle ajani publitseeritud andmetest. Tabelis 4 toodud andmed on leitud nimetatud allikas toodud andmete põhjal. Tabelis 4 on näidatud alküülbenseenide pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurk ja algordinaat. Samuti on toodud ära ühendite molekulaarmassid ja massiga üheselt seotud vesinike ja süsinike arv aine molekulide ahelas ja kõrvalahelas.

Tabel 4. Alküülbenseenide sirgete tegurid ja molaarmassid (Jasper, 1972)

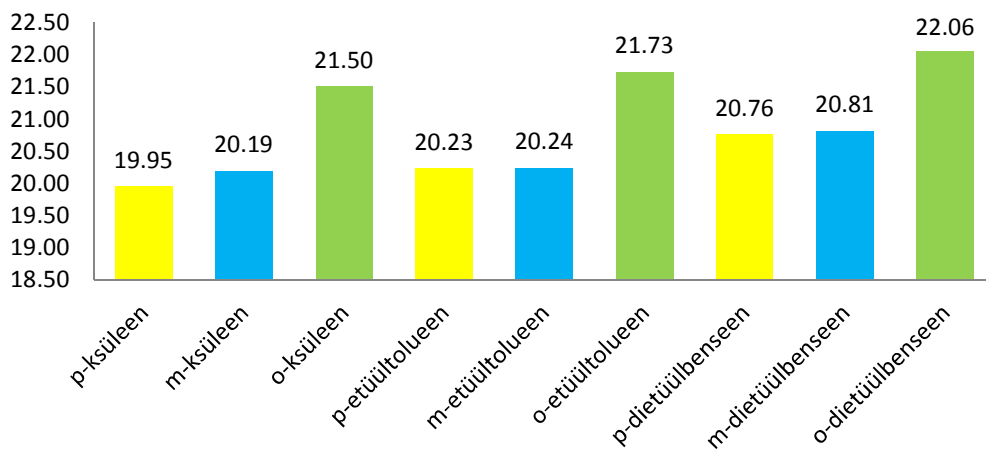
Aine	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	molaarmass, g/mol	H arv	C arv	C arv kõrvalahelas
benseen	-0,1291	31,45	78,11	6	6	0
etüülbenseen	-0,1094	31,48	106,17	10	8	2
o-ksüleen	-0,1101	32,51	106,16	10	8	2
m-ksüleen	-0,1104	31,23	106,16	10	8	2
p-ksüleen	-0,1075	30,70	106,16	10	8	2
propüülbenseen	-0,1117	31,46	120,19	12	9	3
o-etüültolueen	-0,1060	32,33	106,17	12	9	3
m-etüültolueen	-0,1105	31,29	106,17	12	9	3
p-etüültolueen	-0,1075	30,98	106,17	12	9	3
1,2,4- trimetüülbenseen	-0,0994	31,46	120,19	12	9	3

1,2,3-trimetüülbenseen	-0,1040	30,91	120,19	12	9	3
1,3,5-trimetüülbenseen	-0,0897	29,79	120,19	12	9	3
butüülbenseen	-0,1025	31,28	134,22	14	10	4
isobutüülbenseen	-0,0096	29,39	134,22	14	10	4
o-dietüülbenseen	-0,1029	32,35	134,22	14	10	4
m-dietüülbenseen	-0,1049	31,26	134,22	14	10	4
p-dietüülbenseen	-0,1030	31,06	134,22	14	10	4
tsümeen	-0,0877	28,83	134,21	14	10	4
pentüülbenseen	-0,0931	31,31	148,24	16	11	5
fenüüldekaan	-0,0883	32,73	218,38	26	12	6

Joonisel 2 on näidatud alküülbenseenide pindpinevuse sõltuvus molaarmassist. Alküülbenseenide pindpinevuse puhul on näha seos, et molaarmassi kasvades, pindpinevus suureneb. Eranditeks on vaid hargnenud kõrvalahelaga tsümeen ja isobutüülbenseen. Nende ainete puhul on madalamaks pindpinevus põhjuseks asjaolu, et temperatuuri tõustes hakkavad suurtes molekulides olevad molekulidevahelised sidemed kiiremini katkema kui kompaktses, kuid väiksema molaarmassiga ainete molekulides. Sarnase molaarmassiga ainete pindpinevuse võrdluses ilmneb, et pindpinevus sõltub kõrvalahelate paiknemisest peaaheas. Analüüsidest andmeid, esineb tendents, et sarnase üldvalemiga ainete puhul on madalama pindpinevusega see ühend, milles kõrvalahel paikneb para-asendis ning kõige suurem on pindpinevus ainel, milles kõrvalahel on orto-asendis (joonis 3).

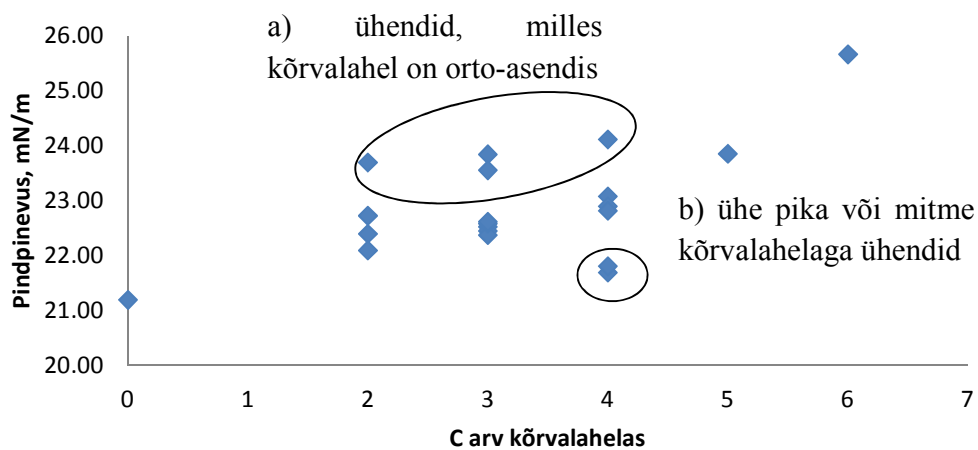


Joonis 2. Alküülbenseenide pindpinevuse sõltuvus molaarmassist



Joonis 3. Orto-, meta - ja paraasendi pindpinevused

Joonisel 3 on näidatud orto-, meta- ja para-asendis kõrvalahelatega ainete pindpinevused 100 °C juures. On näha tendents, et orto-asendis oleva kõrvalahelaga aine pindpinevus on oluliselt kõrgem kui teistel sama molekulvõrrandiga ainetel. Meta- ja para-asendis kõrvalahelatega ainete puhul on märgatavalt väiksem vahe, kuid meta-asendis paikneva kõrvalahelaga aine pindpinevus on kõrgem.



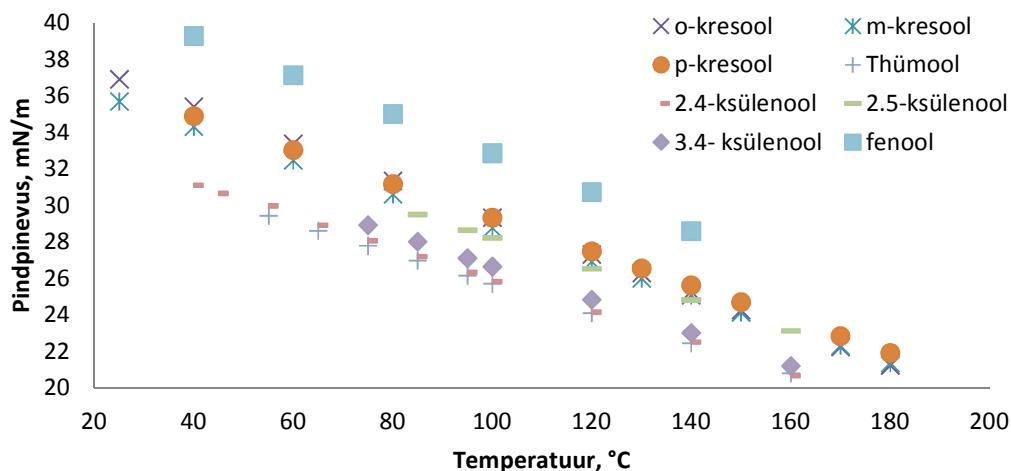
Joonis 4. Alküülbenseenide pindpinevused sõltuvus kõrvalahela süsiniku arvust

Jooniselt 4 näeb, et alküülbenseenide pindpinevused kasvavad, kui kõrvalahela süsinike arv suureneb. Punktid, mis on oluliselt kõrgemal kui ülejäänud, on ained, milles on orto-asendi

kõrvalahel. Punktis a väljatoodud aineteks on o-ksüleen, o-etüültolueen, o-dietüülbenseen ja 1,2,4-trimetüülbenseen. Punktid, mis on all pool kui ülejäänud, on ained, milles on pikk kõrvalahel või on kõrvalahelaid mitu. Punktis b väljatoodud aineteks on tsümeen, mille kõrvalahelas on 4 süsinikku ning isobutüül, millel on kaks kõrvalahelat.

OH- rühma sisaldavad ained

Pindpinevuste andmetest on selgelt näha tendents, et OH-rühma lisamine molekuli tõstab ühendi pindpinevust.. Ained, milles OH-sidemed figureerivad tugevamalt, on kõrgema pindpinevusega, kui ained, milles OH-sidemed on sekundaarsed või puuduvad üldse. Kõige kõrgema pindpinevusega aine on vesi, kuna koosneb vaid hapnikust ja vesinikust vesinikust, mistõttu moodustuvad seal molekulide vahel tugevad vesiniksidemed. Sarnaste ühendite võrdluses on fenooli pindpinevus märgatavalt kõrgem kui benseenil, kuna esimene sisaldab OH-rühma.

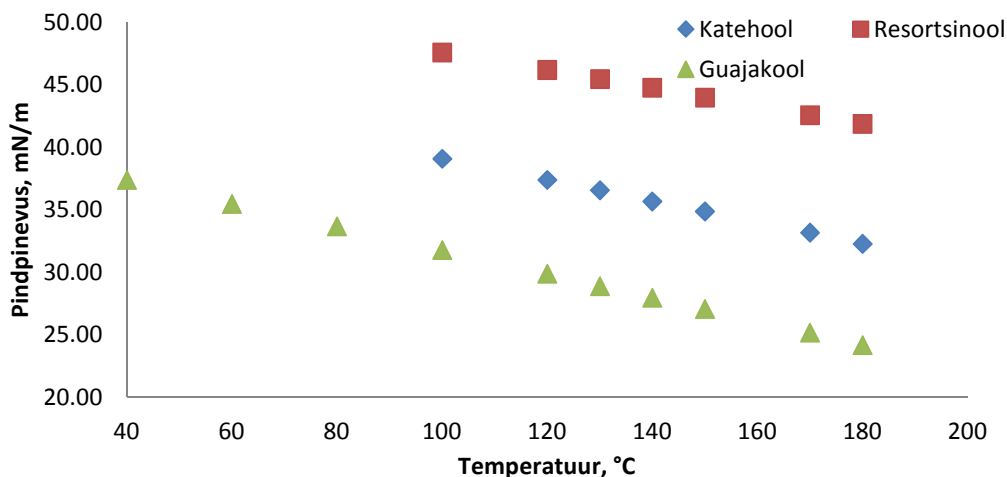


Joonis 5. Ühe OH-rühmaga benseeni derivaadid (Jasper, 1972)

Jooniselt 5 on näha, et lisades fenoolile ühe metüülrühma (kresool), väheneb ühendi pindpinevus ligikaudu 4 mN/m. Teise metüülrühma lisamisel väheneb pindpinevus täiendavalt veel umbes 3 mN/m võrra (ksüleenool).

Kahealuseliste fenoolide kohta leidub kirjanduses pindpinevuse andmeid väga vähe – vaid resortsinooli (1,3-dihüdrosübenseen) ja katehooli (1,2-dihüdrosübenseen) kohta. 1,4-

dihüdrosübenseeni kohta andmed puuduva, eeldatavasti tulenevalt tema kõrgeast sulamispunktist. Kahealuseliste ainete puhul resortsinooli ja katehooli andmetele põhinedes ilmneb tendents, et para- ja orto-asendi kõrvalahelatega aine pindpinevus on kõrgem kui meta- ja orto-asendis oleval ainel.



Joonis 6. Kahe hapnikku sisaldava kõrvalrühmaga benseeni derivaadid (Jasper, 1972)

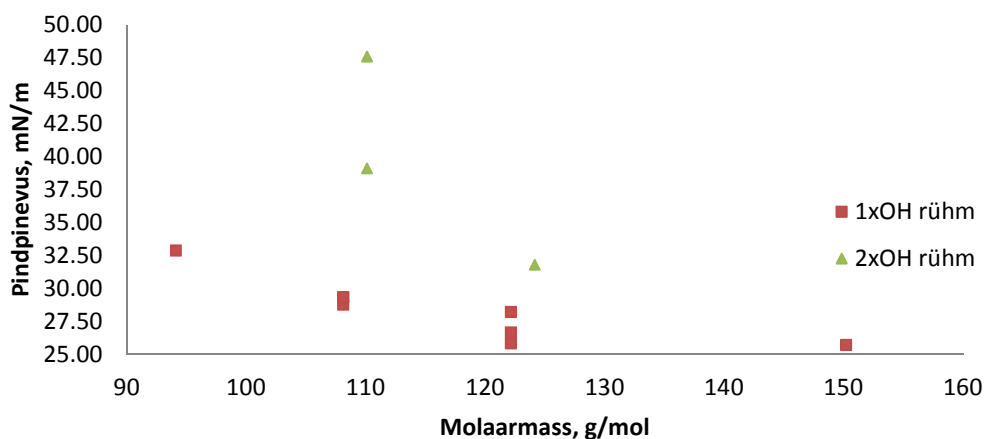
Jooniselt 6 näeb, et kui asendada vesiniksidet moodustav rühm (OH-rühm) metüülrühmaga, väheneb pindpinevus ligikaudu 8 mN/m võrra.

Tabel 5. OH-rühmaga ainete pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldavate sirgevõrrandite tegurid ja molekuli iseloomustavad suurused (J Jasper, 1972)

Aine	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	molaarmass, g/mol	H arv	C arv	O arv	C arv kõrvalahelas
Katehool	-0,0847	47,58	110,1	6	6	2	0
Resortsinool	-0,0716	54,79	110,1	6	6	2	0
Guajakool	-0,0941	41,18	124,14	8	7	2	1
o-kresool	-0,1011	39,43	108,14	8	7	1	1
m-kresool	-0,0924	38,00	108,14	8	7	1	1
p-kresool	-0,0926	38,58	108,14	8	7	1	1
fenool	-0,1079	43,40	94,11	6	6	1	0
Thümol	-0,0821	33,94	150,24	14	10	1	4
2,4-ksüleenool	-0,0870	34,60	122,16	10	8	1	2
2,5-ksüleenool	-0,0848	36,70	122,16	10	8	1	2
3,4-ksüleenool	-0,0909	35,74	122,16	10	8	1	2

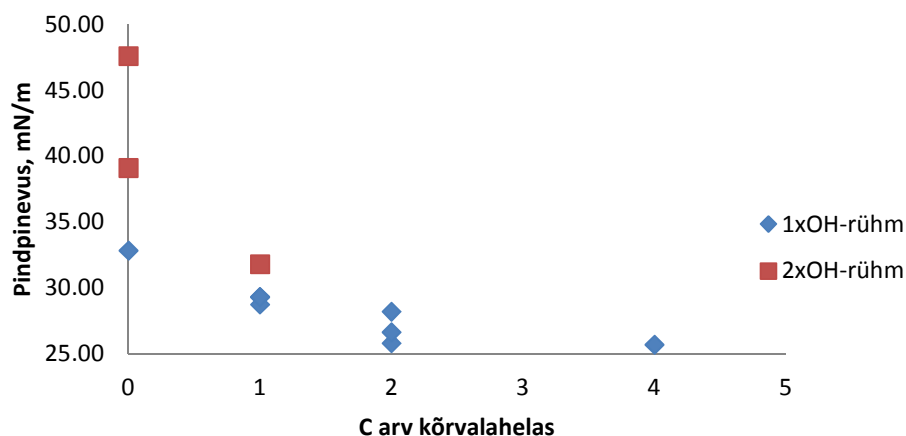
Tabelis 5 on näidatud OH-rühma sisaldavate ainete sirgevõrrandite tegurid. Samuti on tabelis ühendite molaarmass ning aine molekulvalemis olevate vesinike, süsinike ja hapniku molekulide arv. Analüüsidest eraldi aineid, milles on kaks OH-rühma ja üks OH-rühm, saab teha tõusunurkade muutumise põhjal järeldused:

- Kaht OH-rühma sisaldavate ainete puhul metüülrühm suurendab tõusunurka ja OH-rühm vähendab tõusunurka.
- Üht OH-rühma sisaldavate ainete puhul metüülrühm vähendab tõusunurka ja OH-rühm suurendab tõusunurka.



Joonis 7. OH-rühmaga ainete pindpinevuse sõltuvus molaarmassist

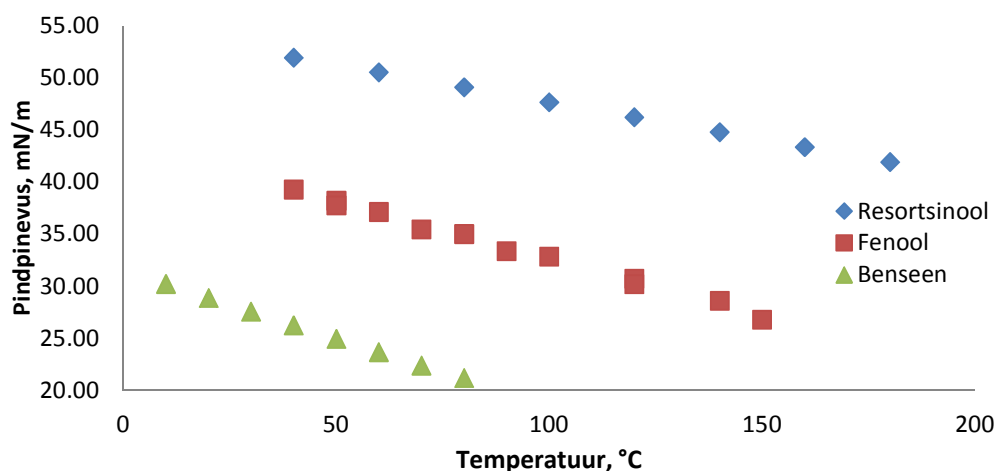
Joonisel 7 on näidatud, kuidas muutub OH-rühma sisaldavate ühendite molaarmassi suurenedes. OH-rühma sisaldavate ainete puhul on näha, et pindpinevused vähenevad molaarmassi kasvades. Sarnaselt alküülenseenidelegi on võrdsete molaarmassidega ainete korral madalama pindpinevusega enam hargnenud ahelaga ühend.



Joonis 8. OH-rühmaga ainete pindpinevuse sõltuvus süsinike arvust kõrvalahelas

Jooniselt 8 näeb, et ainete pindpinevused muutuvad väiksemaks, kui kõrvalahela süsinike arvu suureneb.

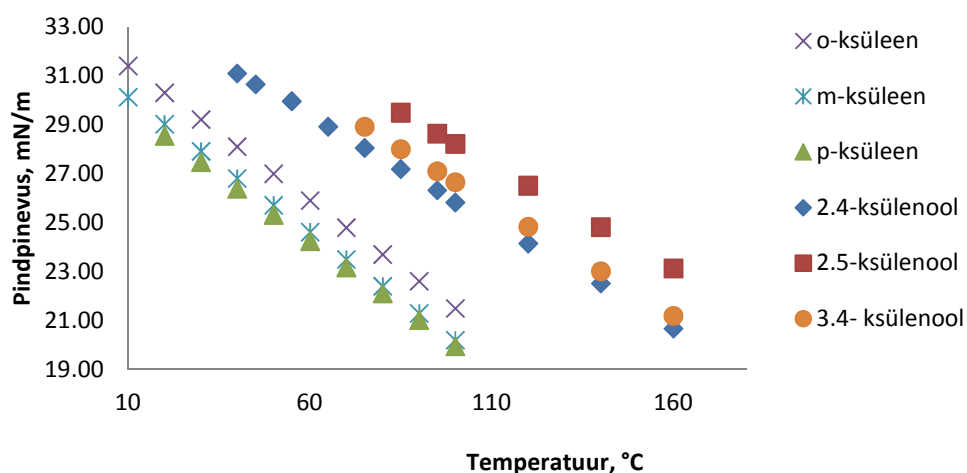
Alküülbenseenide ja OH-rühma sisaldavate ühendite pindpinevuste võrdlus



Joonis 9. OH-rühma mõju pindpinevusele (Jasper, 1972)

Joonisel 9 on näidatud benseeni, fenooli ja resortsinooli resortsinooli pindpinevuste sõltuvus temperatuurist. Resortsinooli pindpinevuste väärtused on saadud arvutuslikult sirge võrrandist ning on ekstrapoleeritud alla sulamispunkti. Andmetest on võimalik teha järeldus, et benseeni tuumale ühe OH-rühma lisamine suurendab aine pindpinevust ca 13 mN/m. 40 °C juures on benseeni

pindpinevus 26,25 mN/m, fenooli pindpinevus 39,27 mN/m ja arvutuslikult saadud resortsinooli pindpinevus 51,92 mN/m. Resortsinooli tõusunurk on -0,0716 ja algordinaat 47,58, fenooli tõusunurk on -0,1079 ja algordinaat 43,40 ning benseeni tõusunurk on -0,1291 ja algordinaat 31,45.



Joonis 10. Ksüleenide ja ksülenoolide pindpinevuse võrdlus (Jasper, 1972)

Joonisel 10 on näidatud kuidas ksüleenide ja ksülenoolide pindpinevused. Saab järeldada, et OH-rühma lisamine ühe metüül kõrvalahelaga benseenituumale suurendab ühendi pindpinevust ligikaudu 6 mN/m ehk metüülrühma lisamine fenoolile vähendab pindpinevust 6 mN/m. 100 °C juures on p-ksüleeni pindpinevus 19,95 mN/m, m-ksüleeni pindpinevus 20,19 mN/m ja o-ksüleeni pindpinevus 21,5 mN/m ning 2,4-ksülenooli pindpinevus 25,83mN/m, 3,4-ksülenooli pindpinevus 26,65 mN/m ja 2,5-ksülenooli pindpinevus 28,22 mN/m. O-ksüleeni tõusunurk on -0,1101 ja algordinaat 32,51, m-ksüleeni tõusunurk on -0,1104 ja algordinaat 31,23, p-ksüleeni tõusunurk on -0,1075 ja algordinaat 30,70 ning 2,4-ksülenooli tõusunurk on -0,0870 ja algordinaat 34,60 ja 2,5-ksülenooli tõusunurk on -0,0848 ja algordinaat 36,70 ning 3,4-ksülenooli tõusunurk on -0,0909 ja algordinaat 35,74.

3. Eksperimentaalne osa

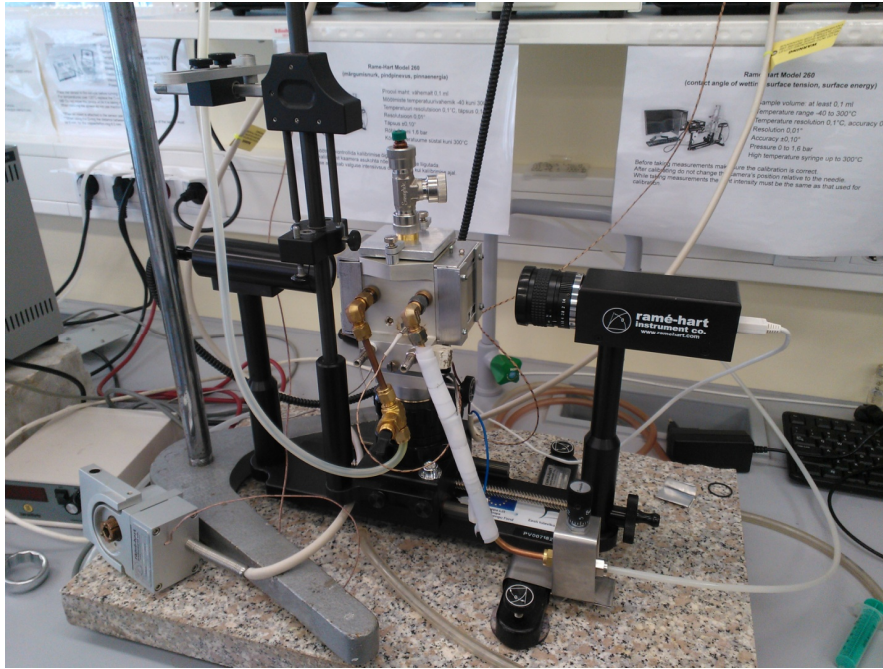
3.1 Mõõtemetoodika

Mõõtmismeetod

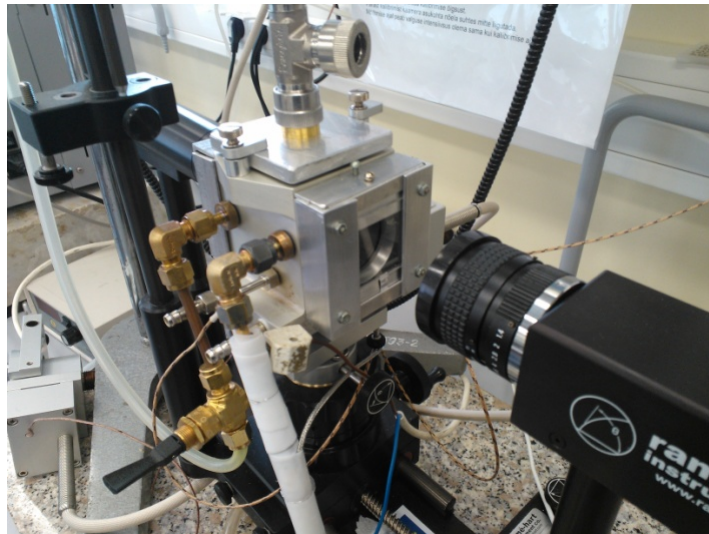
Katselises osas kasutati mõõtemetodina rippuva tilga meetodit. Pindpinevuse mõõtmiseks selle meetodiga kasutati süstalt, mille sisse pandi uuritav aine ning seejärel paigutati süstal selle jaoks ettenähtud pessa nii, et nõela ots oli mõõtekambris ning nõela otsa tekitati tilk. Seejärel tilka vaadeldi fotosilmaga, kasutades spetsiaalset programmi kuvati pilt arvuti ekraanile ja programmis teostati mõõtmine.

Seade

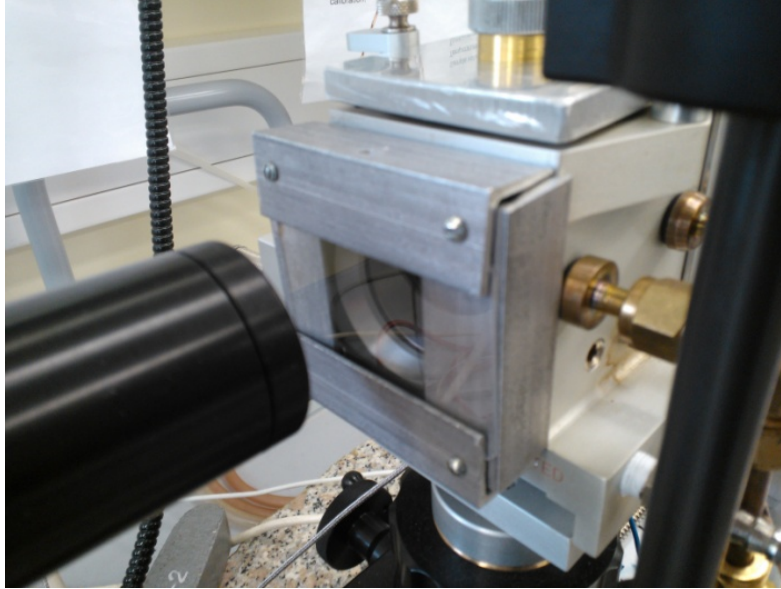
Pindpinevuse mõõtmiseks kasutati seadet Ramê-Hart mudel 260 (joonis 11). Seade on universiaalne, sellega on võimalik analüüsida vedelikke tilga, tagurpidi tilga, langenud tilga ja mulli meetodil. Antud katsete tegemisel kasutatud Ramê-Hart mudel 260 on tehtud veel mõned modifikatsioonid ja lisatud süsteemile täpsuse suurendamiseks komponente. Lisatud on süstlast väljuva proovi temperatuuri mõõtmiseks termopaar. Siseneva lämmastiku soojendamiseks kambri temperatuurini juhiti lämmastik läbi soojusvaheti, mille temperatuuri reguleeriti temperatuurikontrolleriga (Cole Parmer, Thermoworks). Kambrisse loodi lämmastikukeskkond, et vältida proovi oksüdeerumist. Proovi võimaliku kondenseerumise vältimiseks esiklaasile, oli sinna paigutatud lisaklaasid (joonised 12 ja 13). (<http://www.ramehart.com/pdf/260.pdf>, 22.04.2015)



Joonis 11. Ramé-Hart mudel 260 koos modifikatsioonidega



Joonis 12. Kambri lisaaken



Joonis 13. Kambri lisaaken

Arvutuskäik

Mõõtmistulemuste tabelist on kõige olulisemad parameetrid R_0 ja β , mille abil arvutatakse aine pindpinevus võrrandist 3.1:

$$\gamma = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot R_0^2}{\beta}, \text{ kus} \quad (3.1)$$

γ on pindpinevus, mN/m

$\Delta\rho$ on tiheduste erinevus tilga pinna ja ümbritseva keskkonna vahel, kg/m³

g on raskuskiirendus, m/s²

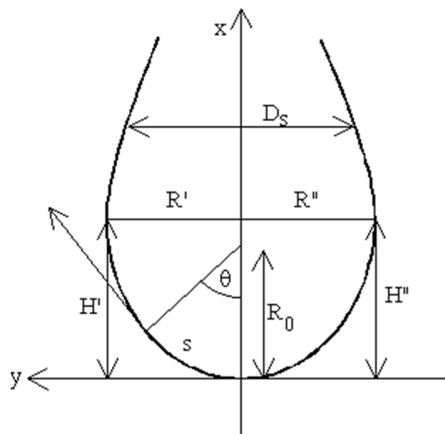
R_0 on tilga raadius, m

β on kujutegur, mis jääb vahemikku -0,55 kuni 1020 (vahemik saadakse võrrandist 3.4)

Võrrand 3.1 on tuletatud Young-Laplace valemist ning on avaldatav ka dimensioonita suurusena (joonis 14):

$$\frac{dx}{ds} = \cos \theta \quad (3.2)$$

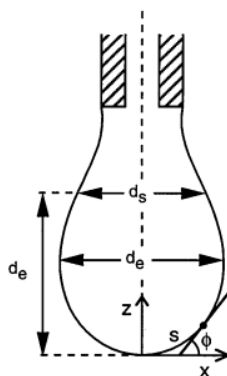
$$\frac{dY}{ds} = \sin \theta \quad (3.3)$$



Joonis 14. Olulised parameetrid uuritava tilga sees

(<http://folk.uio.no/fhansen/Image39.gif>, 16.04.2015)

Joonisel 14 on koordinaattelgedele x ja y kujutatud uuritava vedeliku tilk. Parameeter s on distantis tilga põhjast tilga tippu. Suurused X , Y ja S on dimensioonideta suurused, mis on saadud vastavalt x , y ja s jagamisel R_0 -ga.



Joonis 15. Diameetrite D_E ja D_S asukohad tilgas

(<http://soft-matter.seas.harvard.edu/images/9/9b/Bubble.png>, 16.04.2015)

Harilike tilkade puhul kasutatakse (tilgad, mis on piisavalt pikad, et oleks võimalik mõõta diameetrit D_s) maksimiaalset diameetrit D_E ja suhet $\psi = D_s / D_E$ (joonis 15) ning nende abil saadakse võrrand:

$$\beta = -0.12836 + 0.7577 \psi - 1.7713 \psi^2 + 0.5426 \psi^3 \quad (3.4)$$

Samu andmeid kasutades leitakse ka võrrand $D_E/2R_0$

$$D_E/2R_0 = 0.9987 - 0.1971 \beta - 0.0734 \beta^2 - 0.34708 \beta^3 \quad (3.5)$$

Tilkade jaoks, mis on liiga lühikesed, et saaks D_s määrata kasutatakse tilga kõrgust H ja raadiust $R=D_E/2$ ning asendada võrrandis 3.1 R_0 kõrgusega H , avaldub võrrand kujul (<http://folk.uio.no/fhansen/dropbroc.html>, 16.04.2015):

$$\gamma = \frac{\Delta\rho * g * H^2}{B}, \text{ kus} \quad (3.6)$$

B on parandatud kujutegur

γ on pindpinevus, mN/m

$\Delta\rho$ on tiheduste erinevus tilga pinna ja ümbritseva keskkonna vahel, kg/m³

g on raskuskiirendus, m/s²

H on tilga kõrgus, m

3.2 Mõõtetäpsus

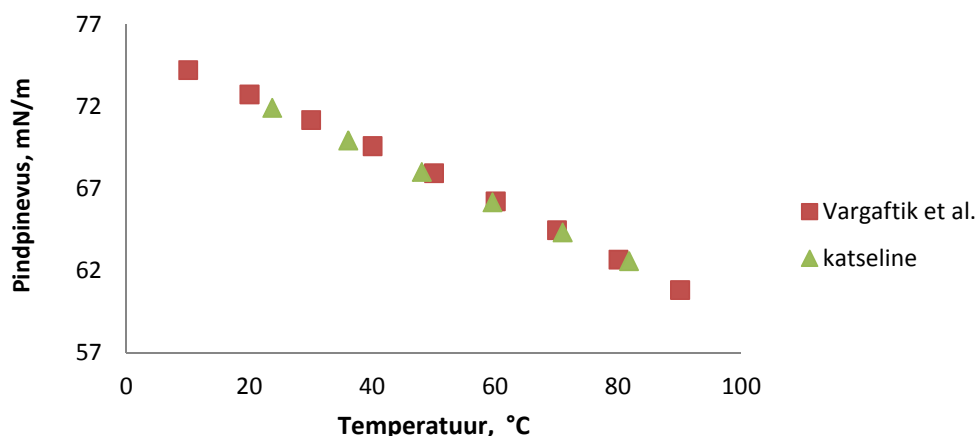
Mõõtmiste täpsuse hindamiseks kasutati järgmisi võrdlusaineid:

- Deioniseeritud vesi
- O-ksüleen, Sigma Aldrich, puhtusastmega > 99%
- Tolueen, Sigma Aldrich, puhtusastmega >99 %
- Klorobenseen, Acros, puhtusastmega >99%
- Heptaan, Acros, puhtusastmega >99 %

Võrdlusained valiti põhinedes olemasolevale kättesaadavale andemete hulgale ning pindpinevuse laiale varieerivusele. Vee pindpinevus on kõrge ning heptaani oma madal, nende pindpinevused erinevad üksteisest rohkem kui 3 korda. Heptaani pindpinevus 20 °C juures on 20,16 mN/m ja vee pindpinevus 72,72 mN/m. O-ksüleeni, tolueni ning klorobenseeni pindpinevused jäävad heptaani ja vee pindpinevuste vahele. Kasutades neid võrdlusandmeid, saab hinnata mõõtetäpsust suures pindpinevuse vahemikus.

Vesi

Vee pindpinevus väheneb temperatuuri kasvades teise astme polünoomina, kuid väikeses temperatuurivahemikus saab teha lihtsustuse ning vaadelda vee pindpinevuse sõltuvust temperatuurist sirgena.



Joonis 16. Katseliselt saadud ja kirjanduses avaldatud (Vargaftik et al., 1983) vee pindpinevuse võrdlus

Tabel 6. Vee katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus

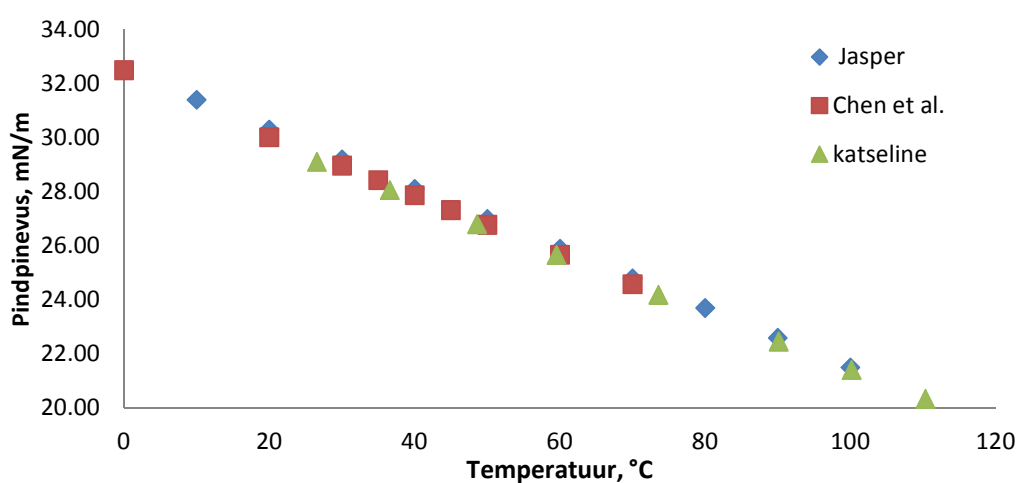
Allikas	tõus	algordinaat	T _{vahemik} , K
Vargaftik et al., 1983	-0,1678	76,161	283.15-363.15
katseline	-0,1610	75,747	296.85-354.85

Vee pindpinevus on rippuva tuga meetodiga mõõdetav umbes 80°C-ni. Kõrgematel temperatuuridel muutub mõõtmine keerukaks suure aurustumiskiiruse tõttu. Katselised mõõtmised ja erinevad kirjanduslikult antud andmed langevad üsna täpselt kokku. Vee puhul on lubatav mõõdetud pindpinevuse erinevus kirjanduslikest andmetest 0,3 mN/m. Antud uurimuses jäid mõõtmistel

saadud tulemused lubatud piiridesse. 30 °C juures on katseliselt saadud tulemuse erinevus kirjanduses esitatud andmetest -0,21 mN/m. 60 °C juures on erinevus. Varfaftik et al. 1983. aastal avaldatud andmetest -0,01 mN/m. 80 °C juures on katseliselt saadud tulemuste ja võrdlusandmete erinevus 0,13 mN/m.

O-ksüleen

O-ksüleeni pindpinevust saab mõõta võrreldes veega kõrgema temperatuurini, kuna tal on kõrgem keemistemperatuur.



Joonis 17. O-ksüleeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Chen et al, 2007 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus

Tabel 7. O-ksüleeni katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus

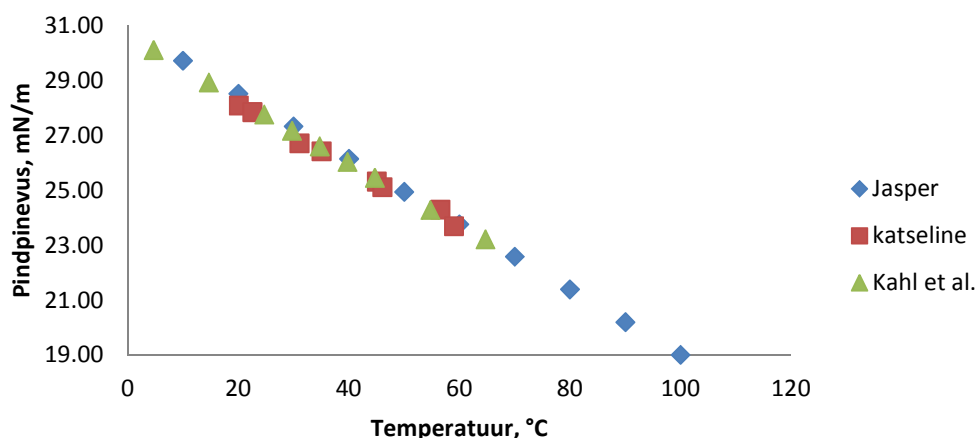
Allikas	tõus	algordinaat	T _{vahemik} , K
Chen et al, 2007	-0,1123	32,388	303.15-343.15
Jasper, 1972	-0,1101	32,512	283,15-373,15
katseline	-0,1048	31,900	299,75-483-45

Katseliselt saadud tulemused langesid paremini kokku Chen et al. 2007. aasta uuringus saadud tulemustega. 30 °C juures oli erinevus 0,21 mN/m, 50 °C juures 0,12 mN/m ja 70 °C juures oli erinevus 0,02 mN/m. Jasperi 1972. aasta kogumikus toodud andmetega võrreldes olid katseliselt saadud tulemuste erinevused suuremad, kuid mida kõrgemaks tõusis temperatuur, seda väiksemaks

muutused erinevused. 30 °C juures oli erinevus 0,45 mN/m, 50 °C juures 0,34 mN/m, 70 °C juures 0,24 mN/m ning 100 °C juures 0,08 mN/m.

Tolueen

Kuigi tolueeni keemistemperatuur on kõrgem kui veel, siis pindpinevuse mõõtmisi saab tolueeniga sooritada kuni temperatuurini umbes 70°C.



Joonis 18. Tolueeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Kahl et. al., 2003 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus

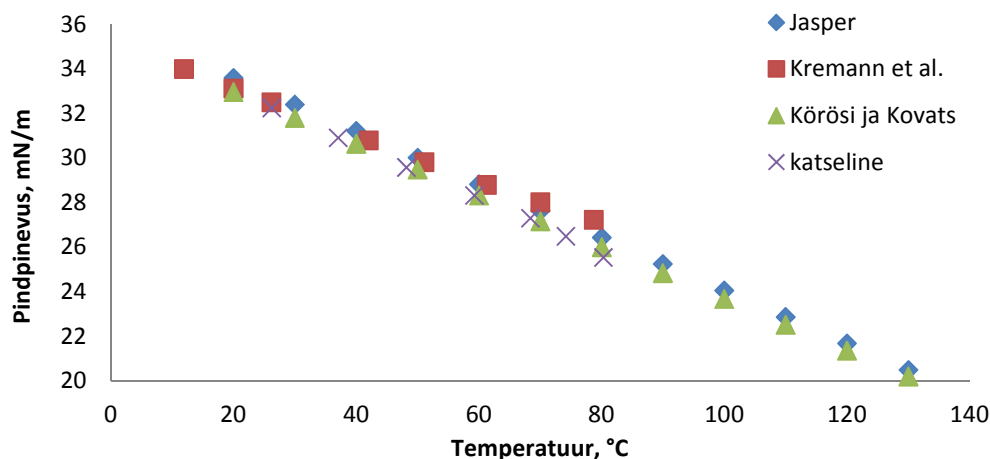
Tabel 8. Tolueeni katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus

Allikas	tõus	algordinaat	T _{vahemik} , K
Kahl et. al., 2003	-0,1150	30,611	277,85-337,85
Jasper, 1972	-0,1189	30,903	283,15-373,15
katseline	-0,1087	30,222	293,25-342,15

Katseliselt saadud tulemused langesid paremini kokku Kahl et. al. 2003. aastal esitatud andmetega. 20 °C juures oli erinevus katseliselt ja kirjanduslike andmete vahel 0,26 mN/m, 40 °C juures 0,14 mN/m ja 60 °C juures 0,01 mN/m. Katseliselt saadud tulemuste erinevused võrreldes Jasper 1972. aastal esitatud andmetega oli suurem. 20 °C juures oli absoluutväärtuslik erinevus 0,47 mN/m, 40 °C juures 0,28 mN/m ja 60 °C juures 0,07 mN/m.

Klorobenseen

Klorobenseeni keemistemperatuur on kõrgem kui veel, kuid pindpinevuse mõõtmisi sooritati kuni temperatuurini umbes 80 °C, kus tilga aurustumine muutus intensiivseks.



Joonis 19. Klorobenseeni katseline ja kirjanduses avaldatud (Kremann et al., 1914, Kõrösi ja Kovats, 1981 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus

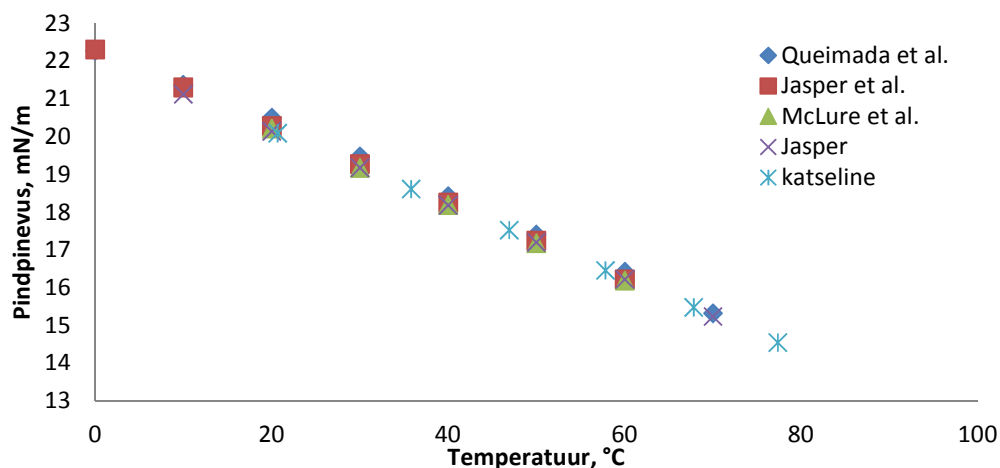
Tabel 9. Klorobenseen katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus

Allikas	tõus	algordinaat	T _{vahemik} , K
Kremann et al., 1914	-0,1022	35,147	285,05-351,85
Jasper, 1972	-0,1191	35,97	283,15-373,15
Kõrösi ja Kovats, 1981	-0,1160	35,28	293,15-403,15
katseline	-0,121	35,427	299,35-353,45

Katseliselt saadud tulemused langevad kõige paremini kokku Kõrösi ja Kovatsi 1981. aasta uuringus saadud andmetega. 30 °C juures on katseliselt saadud tulemuste ja kirjanduslike andmete erinevus 0,04 mN/m, 50 °C juures 0,08 mN/m ja 70 °C juures 0,12 mN/m. Võrreldes Jasperi 1972. aasta kogumikus esitatud ja Kremann et. al., 1914. aastal esitatud andmetega on erinevused suuremad. Võrreldes Kremann et. al. 1914. aastal esitatud andmetega on 30 °C juures erinevus 0,32 mN/m, 50 °C juures 0,64 mN/m ja 70 °C juures 0,96 mN/m. Jasperi 1972. aastal esitatud andmetega võrreldes on vahe pisut väiksem, 30 °C juures on erinevus 0,63 mN/m, 50 °C juures 0,61 mN/m ja 70 °C juures 0,59 mN/m.

Heptaan

Sarnaselt klorobenseenilegi sooritati heptaaniga mõõtmisi kuni temperatuurini ligikaudu 80 °C.



Joonis 20. Heptaanis katseline ja kirjanduses avaldatud (Queimada et. al., 2003, Jasper et al., 1953, McLure et.al., 1982 ja Jasper, 1972) pindpinevuste võrdlus

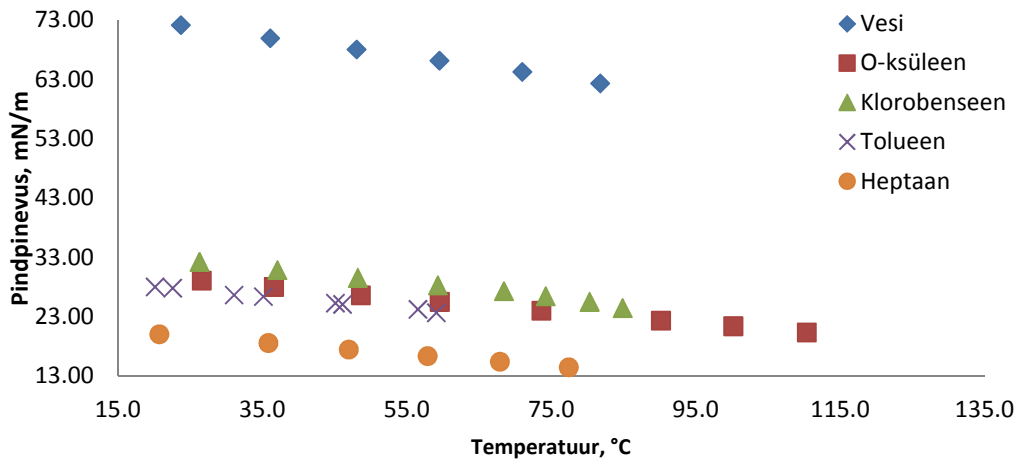
Tabel 10. Heptaanis katseliselt määratud ja kirjanduses avaldatud pindpinevuste andmete alusel leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi tõusu ja algordinaadi võrdlus

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	T _{vahemik} , K
Queimada et. al. 2003	-0,0997	22,39	273,15-343,15
Jasper et al., 1953	-0,1015	22,31	273,15-333,15
McLure et.al., 1982	-0,1003	22,2	293,15-333,15
Jasper, 1972	-0,098	22,10	283,15-343,15
katseline	-0,0978	22,11	293,85-350,55

Katseliselt saadud tulemused ja kirjanduslikud andmed ühtivad üsna hästi. Kõige paremini langevad kokku Jasperi 1972. aasta kogumikus esitatud andmetega. 20 °C juures on katseliste ja Jasperi, 1972 andmetega erinevus -0,02 mN/m, 40 °C juures on erinevus samuti -0,02 mN/m ja 60 °C juures -0,02 mN/m. Võrreldes McLure et al. 1982. aastal avaldatud andmetega on 20 °C juures erinevus 0,05 mN/m, 40 °C juures -0,01 mN/m ja 60 °C juures on erinevus -0,05 mN/m. Võrreldes Jasper et al. 1953. aastal esitatud andmetega on katseliselt saadud tulemuste erinevus 20 °C juures 0,12 mN/m, 40 °C juures 0,05 mN/m ja 60 °C juures -0,02 mN/m. Kõige kehvemini ühtivad

katseliselt saadud andmed Queimada et. al. 2003 aasta uuringus saadud andmetega, 20 °C juures on erinevus 0,34 mN/m, 40 °C juures 0,22 mN/m ja 60 °C juures 0,18 mN/m.

Hinnang mõõtetäpsusele



Joonis 21. Katselised tulemused võrdlusainetele

Joonisel 21 olevate võrdlusainete pindpinevused on laias pindpinevuste vahemikus, kuid tihedamalt on kaetud pindpinevuste väärtuste vahemik 15 mN/m kuni 33 mN/m-ni. Aineid, mille pindpinevuse väärtused oleksid vahemikus 35 kuni 60 mN/m, pole saadaval piisava puhtusega või sobivate omadustega. Antud pindpinevuste väärtuste vahemikku jääb näiteks fenool, kuid fenooli puhul erinevad pindpinevuse võrdlusandmed ühel temperatuuril suhteliselt palju. Näiteks on 80 °C juures leitud andmete omavaheline erinevus 1,58 mN/m ja 60 °C juures on erinevus 0,59 mN/m.

Vee puhul on katseliselt saadud tulemuse ja kirjanduslike andmete keskmiseks erinevuseks -0,04 mN/m (LISA tabel 24). Lubatud erinevuseks on antud 0,3 mN/m. Vee puhul on võrdlusandmed mõõdetud kapillaarse tõusu meetodil, katselised aga on mõõdetud rippuva tilga meetodiga.

O-ksüleeni puhul võrdlusandmete omavaheline erinevus pole väga suur, kuid on stabiilselt üle 0,21 mN/m (LISA tabel 25). Erinevus võrdlusandmete vahel võib olla põhjustatud erinevate mõõtemetodite kasutamisest. Chen et.al, 2007. aastal avaldatud uuringus kasutati maksimaalse mulli rõhu meetodit, kuid Jasperi 1972. aastal avaldatud kogumikus on kasutatud kapillaarse tõusu meetodit. Võrreldes Chen et al, 2007. aastal avaldatud tulemustest erinevad katseliselt saadud tulemused keskmiselt -0,14 mN/m ja Jasperi andmetest -0,37 mN/m (LISA tabel 26).

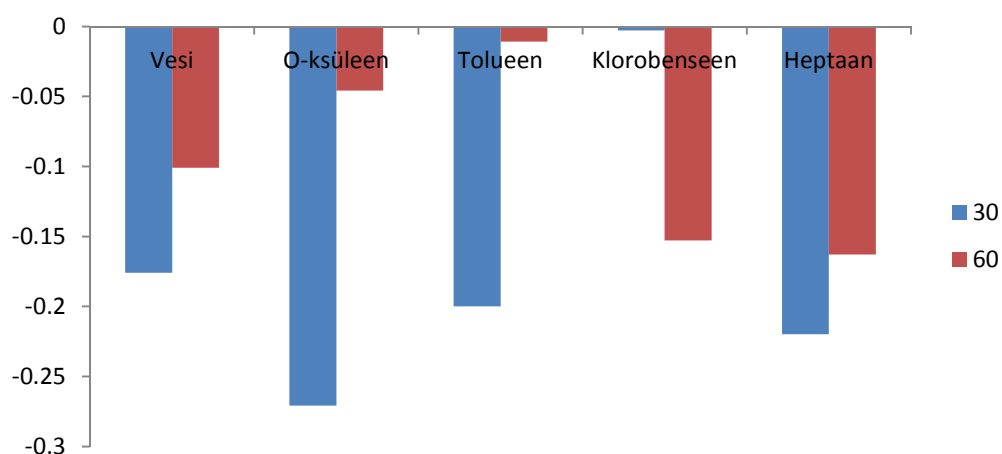
Tolueeni puhul on võrdlusandmete omavaheline kokkulangevus üsna hea ning paraneb temperatuuri tõusuga. Kahl et al., 2003 ja Jasper, 1972 antud tulemused erinevad omavahel 0,06-0,21 mN/m (LISA tabel 27). Väike erinevus võib olla tingitud erinevatest mõõtemetoditest. Kahl et al. kasutas 2003. aastal avaldatud uuringus modifitseeritud rippuva tilga meetodi ja Jasper 1972. aasta kogumikus on kasutatud kapillaarse tõusu meetodit. Võrreldes Kahl et al. 2003. aastal avaldatud uuringus saadud tulemustest, erinevad katseliselt saadud tulemused keskmiselt -0,14 mN/m ning 1972. aastal avaldatud Jasperi kogumiku tulemustest -0,27 mN/m (LISA tabel 28).

Klorobenseeni puhul on võrdlusandmete omavaheline sobivus üsna halb. 40 °C juures näiteks erinevad kirjanduse andmed üksteisest kuni 0,57 mN/m ja 80 °C juures 0,97 mN/m (LISA tabel 29). Katseliste andmete suhtes on kõige väiksem keskmine viga võrreldes Körösi ja Kovatsi 1981. aastal avaldatud uurimuse tulemustega ja kõige suurem on keskmine erinevus Kremann et al. 1914. aastal avaldatud uuringu tulemustega. Keskmine erinevus Körösi ja Kovatsi 1981. aastal avaldatud uurimuse tulemustega on -0,08 mN/m ja Kremann, et al. 1914. aastal avaldatud uuringuga -0,64 mN/m (LISA tabel 30).

Heptaani puhul on kirjanduses leiduvatest andmetest omavahel kokkulangevad kolm andmekomplekti, kuid üks erineb teistest olulisel määral (LISA tabel 31). Ka katseliselt saadud tulemustega võrreldes on teiste võrdlusandmetega halvasti kokkulangevad Queimada et al. 2003. aastal avaldatud töö tulemused kõige halvemini ühtivad. Keskmine viga Queimada et al. 2003. aastal avaldatud töö tulemustega on -0,20 mN/m. Mittesobitavas töös kasutati mõõtemetodina Wilhelmy plaadimeetodit, teistes kirjandusest leitud uuringutes kasutati kapillaarse tõusu meetodit. Võrreldes ülejäänud võrdlusandmetega on keskmine erinevus väiksem ja suhteliselt hästi ühtiv. Jasperi kogumikus 1972. aastal avaldatud tulemustega on keskmine erinevus 0,02 mN/m, Jasper, et al. 1953. aastal avaldatud tulemustega võrreldes on erinevus -0,01 mN/m ja McLure, et al., 1982. aasta avaldatud uuringuga võrreldes 0,04 mN/m. Seega võrreldes kolme viimase võrdlusandmetega on katseliselt saadud tulemuste keskmine erinevus 0,01 mN/m (LISA tabel 32). Tabelis 11 on kokkuvõtlikult näidatud katseliselt ja kirjandusest saadud võrdlusainete tõusunurk ja algordinaat ning temperatuurivahemik, kus toodud tulemused on mõõdetud.

Tabel 11. Võrdlusainete mõõdetud sirgete tõusud (b) ja algridinaadid (a) võrreldes kirjanduse andmetega

Aine	Mõõdetud			Kirjanduse andmed		
	a, mN/m	b, mN/m*K	T _{vahemik} , K	a, mN/m	b, mN/m*K	T _{vahemik} , K
Vesi	76,07	-0,1674	296,45-354,85	76,32	-0,1699	273,15-373,15
O-ksüleen	31,90	-0,1048	299,75-483,45	32,40	-0,1123	303,15- 343,15
Tolueen	30,22	-0,1087	293,25-342,15	30,61	-0,115	277,85-337,85
Klorobenseen	35,43	-0,121	299,35-353,45	35,28	-0,116	293,15-403,15
Heptaan	22,11	-0,0978	293,85-350,55	22,39	-0,0997	273,15-343,15



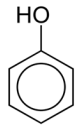
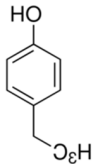
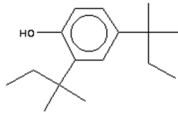
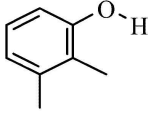
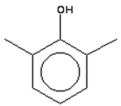
Joonis 22. Mõõdetud ja kirjandusest leitud võrdlusainete pindpinevuste erinevused 30 ja 60 °C juures

Joonisel 22 on näidatud 30 ja 60 °C juures võrdlusainete absoluutväärtuse erinevused katseliselt saadud tulemuste ja kirjandusest saadud andmete vahel. Tulemused näitavad, et üldiselt on käesoleva töö raames mõõdetud pindpinevuste väärtustest arvatud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurk pisut väiksem kui kirjanduses antud andmete kaudu leitud tõusunurk. Seetõttu üldiselt ka temperatuuri tõusuga erinevus mõõdetud ja võrdlusandmetena kasutatud pindpinevuste väärtuste vahel väheneb. Erandiks on ainult klorobenseen. Üldiselt võib siiski öelda, et keskmine pindpinevuste erinevus on väike, 30°C juures alla 0,2 mN/m ja 60 °C juures alla 0,1 mN/m.

3.3 Uuritud fenoolid

Töö eesmärgiks oli hinnata OH-rühma mõju ainete pindpinevusele. Kuna eksperimentaalseid andmeid fenoolsete ühendite pindpinevuste kohta on ebapiisavalt, siis antud töö eksperimentaalses osas mõõdeti pindpinevused erinevatel temperatuuridel viiele fenoolile. Tabelis 12 on toodud nende füüsikalised omadused ja struktuur. Võrdlusandmete olemasolul on esitatud katsetulemuste võrdlus kirjanduses leitavate pindpinevuste väärtustega.

Tabel 12. Uuritud fenooliühendid

Aine	Molaarmass, g/mol	T _{sulamis} , °C	T _{keemis} , °C	Tihedus, g/ml	Struktuur	Kasutatud kirjandus
Fenool	94,11	40-42	182	1,071 (25° C)		http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Phenol-2D-skeletal.png , 06.04.2015
4-etüülfenool	122,16	40-42	218-219	1,011 (20° C)		http://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB2106353.htm , 06.04.2015
2,4-ditertamüül-fenool	234,38	25	169-170	0,93 (25° C)		http://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB6286516.htm , 06.04.2015
2,3-dimetüül-fenool	122,16	70-73	217	1,014 (20° C)		http://static.coleparrmer.com/large_images/AGROS11652.jpg , 07.04.2015
2,6-dimetüül-fenool	122,16	43-45	203	1,15 (20° C)		http://www.chemicalbook.com/ProductMSDSDetailCB3443747_EN.htm , 07.04.2015

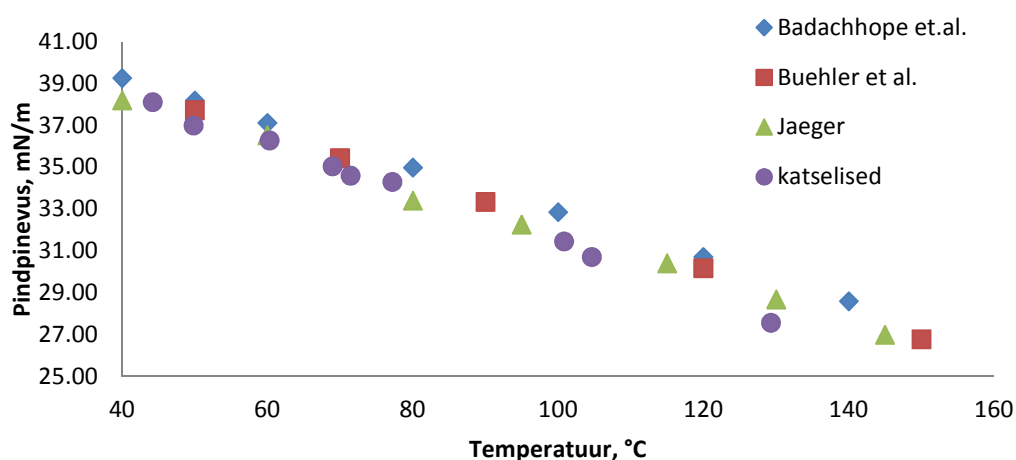
Rippuva tilga meetodika puhul on tarvis pindpinevuse arvutamiseks teada tihedusi (võrrand 2.4). Seetõttu määrati katseliselt tabelis 12 toodud fenoolsete ühendite tihedused, kasutades tihedusemõõtjat Anton Paar DMA 5000M. Tiheduse sõltuvused temperatuurist on toodud tabelis 13.

Tabel 13 Fenoolsete ühendite tiheduse sõltuvus temperatuurist

Aine	Tiheduse muutus, g/cm ³ *K	Algordinaat, g/cm ³	T _{vahemik} , K
Fenool	-0.0009	1,0962	323,15-363,15
4-etüülfenool	-0.0009	1,0317	318,15-363,15
2,4-ditertamüülfenool	-0.0007	0,0947	300,15-363,15
2,3-ksüleenool	-0.0008	1,0589	348,15-363,15
2,6-ksüleenool	-0.0009	1,0378	318,15-363,15

Fenool

Joonisele 23 on toodud kirjandusest leitud pindpinevuse andmed fenoolile ning võrreldud neid katseliselt saadud tulemustega. Nagu näha on võrdlusandmete hajuvus suhteliselt suur, ligikaudu 1 mN/m.



Joonis 23. Katseliselt saadud fenooli ja kirjanduses avaldatud (Buehler, 1932, Badachhope et al. nagu on refereerinud Jasper 1972 ja Jaeger nagu on refereerinud Jasper 1972) pindpinevuste väärtuste võrdlus

Joonisel 23 toodud katsepunktidest tõmmati läbi sirgevõrrand, kasutades tarkvara Microsoft Office Excel 2007 ning saadi sirgevõrrandid. Saadud pindpinevuse temperatuursõltuvust antud temperatuurivahemikus kirjeldavate sirgevõrrandite tõusud ja algordinaadid on toodud tabelis 14.

Tabel 14. Katseliselt saadud ja kirjanduses avaldatud andmetest leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid fenoolile

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	T _{vahemik} , K
Badachhope et al. nagu on refereerinud Jasper 1972	-0,1068	43,54	313,15-413,15
Jaeger nagu on refereerinud Jasper 1972	-0,1071	42,54	313,15-418,15
Buehler et al., 1932	-0,1089	43,15	323,15-423,15
Katseline	-0,1208	43,39	317,35-402,45

Katseliselt saadud fenooli pindpinevuse väärtusi saab lugeda täpseks, kuna võrdlusainetele mõõdetud pindpinevuse väärtused ja kirjanduses leitud andmed pindpinevuse kohta langesid hästi kokku (joonis 22), erinedes keskmisel 0,15 mN/m. Mõõtmisel saadud fenooli pindpinevuse väärtused langevad kokku ka kirjanduses toodud fenooli pindpinevuse andmetega (joonis 23). Kõige paremini sobituvad katseliselt saadud fenooli tulemused Jaegeri uuringus avaldatud pindpinevuse väärtustega. 40 °C juures on pindpinevuste erinevus 0,31 mN/m, 60 °C juures 0,03 mN/m ja 80 °C juures on erinevus -0,24 mN/m. Badachhope uuringus esitatud teise sirgega on kokku langemine halvem. 40 °C juures on erinevus on -0,71 mN/m, 60 °C juures -0,99 mN/m ja 80 °C juures -1,27 mN/m. Võrreldes Buehleri 1932. aasta uuringus esitatud pindpinevustega on katseliselt saadud tulemused paremini kokku langevad. 40 °C juures on erinevus -0,23 mN/m, 60 °C juures -0,47 mN/m ja 80 °C juures -0,71 mN/m.

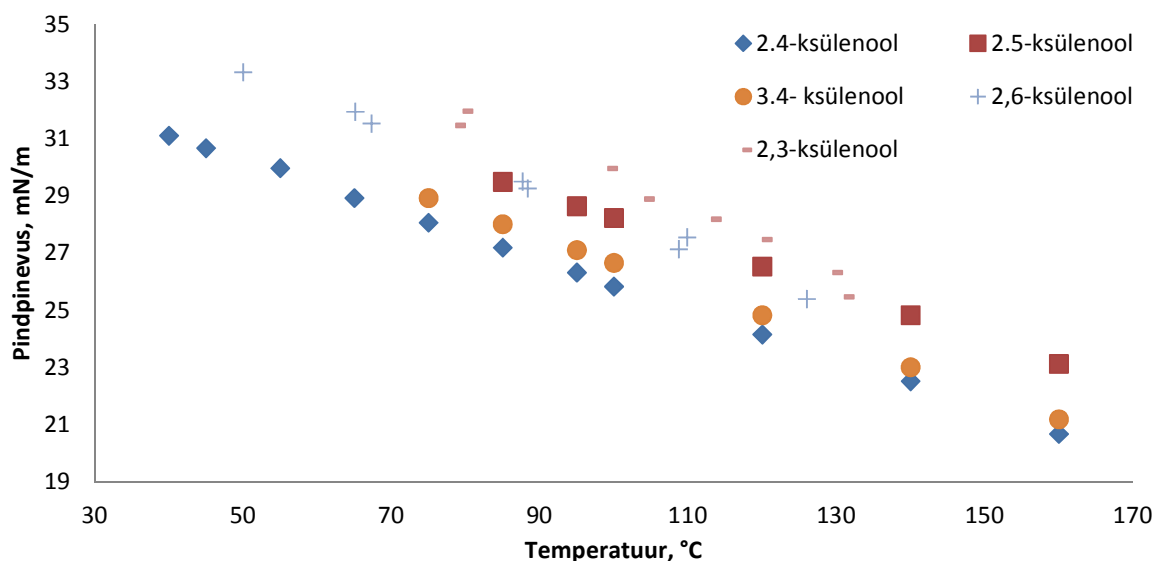
Kuna katselised andmed erinevate fenoolsete ühendite, sealhulgas fenooli, kohta kas puuduvad või on suhteliselt hajuvad, siis tabelis 15 on toodud fenooli struktuuri kaudu leitud parakoori väärtuste abil arvatud pindpinevused 75 °C juures ning ka pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi algordinaadid ja tõusud. Toodud on tulemused, mis on saadud kasutades erinevates allikates pakutud aatomite ja gruppide parakooride väärtuseid (tabel 2). Nagu tulemustest näha, on katseliselt saadud pindpinevus oluliselt madalam võrreldes kirjanduses pakutud parakooride väärtuste abil leitud (võrrand 2.12) tulemustega. Vaid Quayle 1953. aastal avaldatud aatomite ja gruppide parakooride väärtuste abil arvatud fenooli parakoori kasutamisel saadakse kõrgem pindpinevuse väärtuse.

Tabel 15. Katseliselt saadud ja parakoordine väärtuste kaudu leitud fenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,1294	47,78	38,08
Mumford & Philips, 1929	-0,1255	46,37	36,957
Vogel, 1948	-0,1284	47,45	37,82
Quayle, 1953	-0,1127	41,63	33,17
katseline	-0,1208	43,39	34,33

2,3-ksüleenool ja 2,6-ksüleenool

2,3-ksüleenooli ja 2,6-ksüleenooli pindpinevuse andmeid kirjandusest ei leitud, antud aineid võrreldi teiste, kirjanduses olemasolevate ksüleenoolide isomeeride pindpinevuste väärtustega. Joonisele 24 on toodud kirjandusest ksüleenoolide leitud andmed ning võrreldud neid katseliselt saadud saadud 2,3-ksüleenooli ja 2,6-ksüleenooli tulemustega.



Joonis 24. Katseliselt saadud 2,3-ksüleenooli ja 2,6-ksüleenooli võrdlus kirjanduse (Jasper, 1972) andmetega

Katseliselt mõõdetud 2,6-ksüleenooli tulemused sobivad kirjanduses antud ksüleenoolide tulemustega kokku. Kõige paremini sobitub 2,6-ksüleenool ainele ligilähedasema ühendiga 2,5-ksüleenooli ehk 2,5-dimetüülfenooliga.

Katseliselt mõõdetud 2,3-ksüleenooli tulemused on kõrgemad kui teistel ksüleenoolidel. Kirjanduses andmetest ühtib 2,3-ksüleenool kõige paremini 2,5-ksüleenooliga.

Katseliselt saadud ja kirjanduslike ksüleenoolide paigutus on loogiline ja sobitub hüpoteesiga, et kõige kõrgem on ühendi pindpinevus, kus kõrvalahel asetseb orto-asendis ning kõige madalam on juhul kus kõrvalahel on para-asendis.

Joonisel 24 toodud katsepunktidest tõmmati läbi sirgevõrrand, kasutades tarkvara Microsoft Office Excel 2007 ning saadi sirgevõrrandid. Saadud pindpinevuse temperatuursõltuvust antud temperatuurivahemikus kirjeldavate sirgevõrrandite tõusud ja algordinaadid on toodud tabelis 16.

Tabel 16. Katseliselt saadud ja kirjanduses avaldatud andmetest leitud pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid ksüleenoolidele

Aine	Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	T _{vahemik} , K
2,4-ksüleenool	Jasper, 1972	-0,0870	34,60	313,15-433,15
2,5-ksüleenool		-0,0848	36,70	313,15-433,15
3,4-ksüleenool		-0,0909	35,74	313,15-433,15
2,6-ksüleenool	katseline	-0,1034	38,54	323,15-399,15
2,3-ksüleenool		-0,1128	40,78	351,85-404,25

Tabelis 17 ja 18 on toodud 2,6-ksüleenooli ja 2,3-ksüleenooli struktuuri kaudu leitud parakoori väärtuste abil arvatud pindpinevused 75 °C juures ning ka pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi algordinaadid ja tõusud. Toodud on tulemused, mis on saadud kasutades erinevates allikates pakutud aatomite ja gruppide parakoorige väärtuseid (tabel 2). Nagu tulemustest näha, on katseliselt saadud pindpinevus oluliselt madalam võrreldes kirjanduses pakutud parakoorige väärtuste abil leitud (võrrand 2.12) tulemustega.

Tabel 17. Katseliselt saadud ja parakoorida väärtuste kaudu leitud 2,6-ksüleenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid

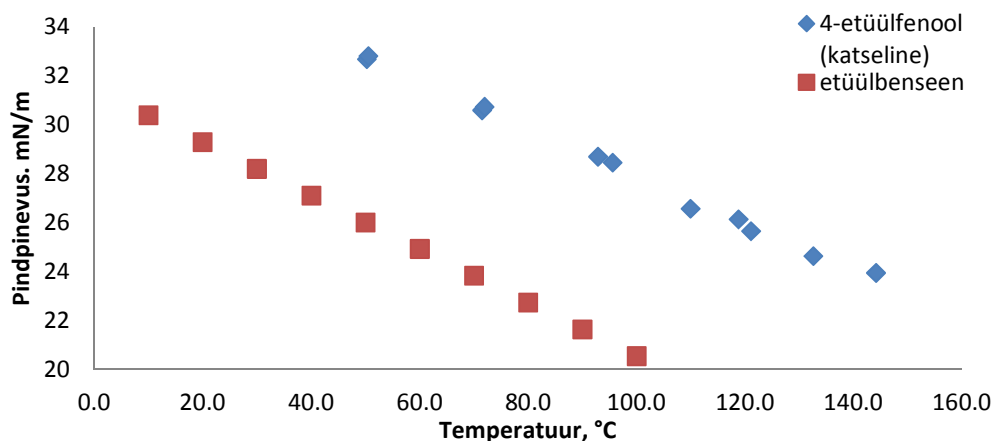
Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	pindpinevus 75 °C juures, mN/m
Sugden, 1924	-0,1230	43,84	34,62
Mumford ja Philips, 1929	-0,1235	44,02	34,75
Vogel, 1948	-0,1256	44,77	35,35
Quayle, 1953	-0,1141	40,66	32,10
katseline	-0,1034	38,54	30,79

Tabel 18. Katseliselt saadud ja parakoorida väärtuste kaudu leitud 2,3-ksüleenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	pindpinevus 75 °C juures, mN/m
Sugden, 1924	-0,1206	47,16	38,11
Mumford ja Philips, 1929	-0,1211	47,34	38,26
Vogel, 1948	-0,1232	48,15	38,91
Quayle, 1953	-0,1119	43,73	35,34
katseline	-0,1128	40,78	32,32

4-Etüülfenool

4-etiüülfenoolil puuduvad kirjanduses pindpinevuse kohta võrdlusandmed.



Joonis 25. Katseliselt saadud etüülfenooli ja kirjanduses antud etüülbenseeni pindpinevuste võrdlus

Tabel 19. Katseliselt saadud 4-etüülfenooli ja kirjanduses antud etüülbenseeni tõusunurgad ja algordinaadid

Aine	Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	T _{vahemik} , K
Etüülbenseen	Jasper, 1972	-0,1094	31,48	283,15-373,15
4-etüülfenool	katseline	-0,0973	37,63	323,45-417,35

Katseliselt saadud 4-etüülfenooli pindpinevus erineb 50 °C juures kirjanduses antud etüülbenseeni väärtuses 6,76 mN/m ja 100 °C juures 7,36 mN/m (joonis 25). Kuna fenoolsete ühendite puhul OH-rühm tõstab ligikaudu 13 mN/m ja etüülrühm vähendab pindpinevust ca 4 mN/m, ning alküülbenseenide puhul etüülrühm tõstab pindpinevust 2 mN/m, siis on saadud pindpinevuste vahe etüülbenseeni ja 4-etüülfenooli vahel usutav. Samal põhimõttele tuginedes saab öelda, et 4-etüülfenooli pindpinevuste erinevus on tõepärane, sest võrreldes teiste fenoolsete ühenditega paigutub graafikule (joonis 27) loogiliselt.

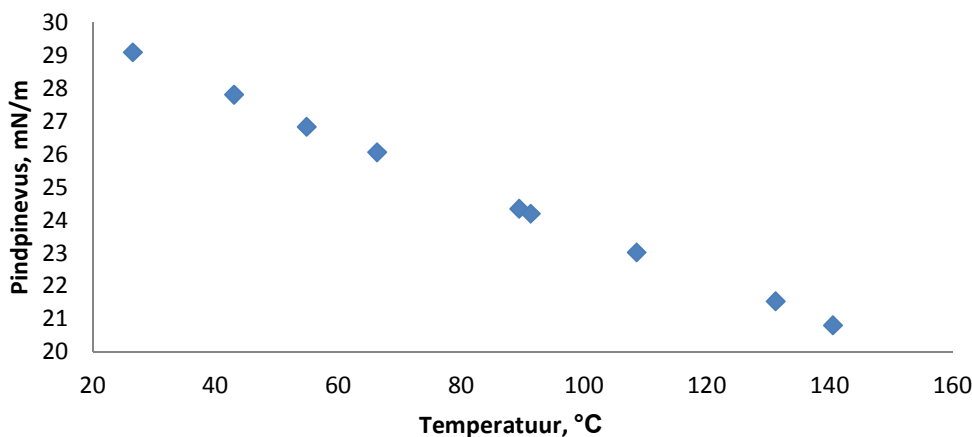
Tabelis 20 on toodud 4-etüülfenooli struktuuri kaudu leitud parakoori väärtuste abil arvatud pindpinevused 75 °C juures ning ka pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi algordinaadid ja tõusud. Toodud on tulemused, mis on saadud kasutades erinevates allikates pakutud aatomite ja gruppide parakooride väärtuseid (tabel 2). Nagu tulemustest näha, on katseliselt saadud pindpinevus oluliselt madalam võrreldes kirjanduses pakutud parakooride väärtuste abil leitud (võrrand 2.12) tulemustega.

Tabel 20. Katseliselt saadud ja parakooride väärtuste kaudu leitud 4-etüülfenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,1163	42,42	33,71
Mumford & Philips, 1929	-0,1168	42,60	33,84
Vogel, 1948	-0,1188	43,33	34,42
Quayle, 1953	-0,1079	39,35	31,26
katseline	-0,0949	37,43	30,31

2,4-ditertamüülfenool

Sarnaselt 4-etiüülfenoolile puuduvad ka 2,4-ditertamüülfenoolil kirjanduses pindpinevuse kohta võrdlusandmed.



Joonis 26. Katseliselt saadud 2,4-ditertamüülfenooli pindpinevus

2,4-ditertamüülfenooli pindpinevus väheneb temperatuuri tõustes lineaarselt. Ühendi tõusunurk on $-0,0719$ ja algordinaat on $30,86$ temperatuurivahemikus $299,65$ - $413,65$ K. 2,4-ditertamüülfenooli katsetulemused on usutavad, kuna aines on pikk kõrvalahel ning seetõttu paikneb graafikul (joonis 27) võrreldes teiste fenoolidega oluliselt madalamal.

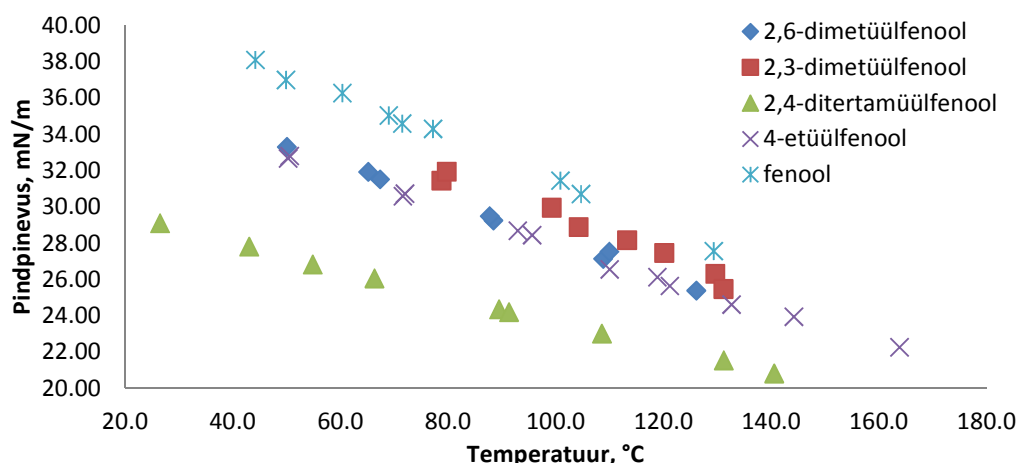
Tabelis 21 on toodud 2,4-ditertamüülfenooli struktuuri kaudu leitud parakoori väärtuste abil arvutatud pindpinevused 75 °C juures ning ka pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava võrrandi algordinaadid ja tõusud. Toodud on tulemused, mis on saadud kasutades erinevates allikates pakutud aatomite ja gruppide parakooride väärtuseid (tabel 2). Nagu tulemustest näha, on katseliselt saadud pindpinevus oluliselt madalam võrreldes kirjanduses pakutud parakooride väärtuste abil leitud (võrrand 2.12) tulemustega.

Tabel 21. Katseliselt saadud ja parakoorida väärtuste kaudu leitud 2,4-diamüülfenooli pindpinevuse väärtused 75 °C juures ning pindpinevuse temperatuursõltuvust kirjeldava sirge võrrandi tõusunurgad ja algordinaadid

Allikas	Tõus, mN/m*K	Algordinaat, mN/m	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,0969	37,97	30,71
Mumford & Philips, 1929	-0,1022	40,06	32,39
Vogel, 1948	-0,1030	40,39	32,67
Quayle, 1953	-0,0983	38,54	31,17
katseline	-0,0719	30,86	25,47

Eksperimentaalsete andmete kokkuvõte ja parakoori hinnang

Katseliselt saadud pindpinevuste väärtused on kokkuvõtlikult esitatud joonisel 27.



Joonis 27. Mõõtmistel saadud fenoolsete ühendite pindpinevused

Fenoolsete ühendite pindpinevuste mõõtmised näitasid, et kõige kõrgem pindpinevus on fenoolil. Pisut madalama on pindpinevus 2,3-dimetüülfenoolil, 2,6-dimetüülfenoolil ja 4-etüülfenoolil. Märkatavalt madalam on pindpinevus 2,4-ditertamüülfenoolil. 80 °C juures on fenooli pindpinevus 33,73 mN/m. 2,3-dimetüülfenooli pindpinevus 80 °C juures on ca 2 mN/m madalam, 2,6-dimetüülfenooli pindpinevus 3,5 mN/m madalam kui fenoolil, 4-etüülfenooli pindpinevus on 80 °C juures ligikaudu 4 ühikut fenooli pindpinevusest madalam ja 2,4-ditertamüülfenooli pindpinevus on 80 °C juures ca 8,5 mN/m fenooli pindpinevusest madalam.

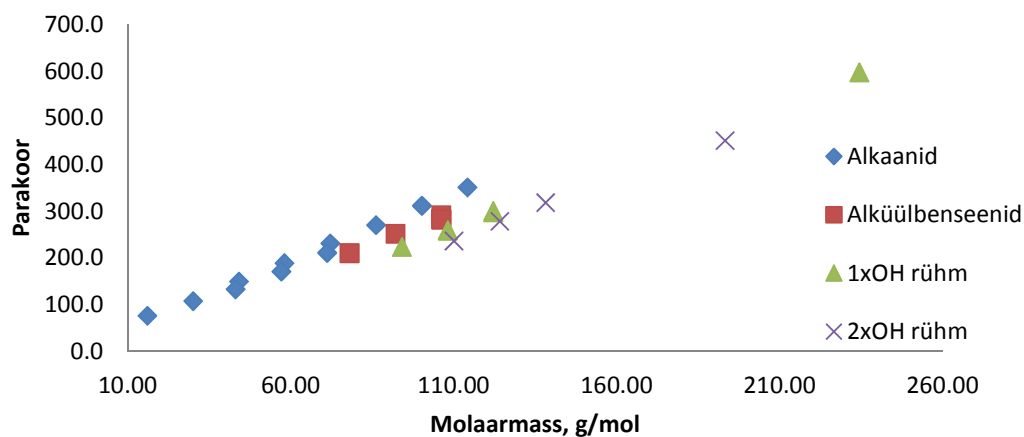
Mõõdetud fenoolsete ühendite puhul kehtivad kirjanduslike andmete põhinedes tehtud hüpoteesid:

- Molaarmassi kasvades pindpinevus väheneb.
- Võrdsete molaarmasside korral erineb pindpinevus kõrvalahela asendi tõttu. Kõige kõrgem on pindpinevus ainetel, mille kõrvalahelal paikneb orto-asendis, seejärel on meta-asendis oleva kõrvalahelaga ainete pindpinevus ja kõige väiksem on para-asendis oleva kõrvalahelaga ainete pindpinevus. Orto-asendis asuva kõrvalahelaga aine pindpinevus on ca 1,5 mN/m võrra kõrgem kui meta- või para-asendis kõrvalrühmaga aine pindpinevus.
- OH-rühma lisamine suurendab pindpinevust ca 13 mN/m võrra, metüülrühma lisamine vähendab pindpinevust ligikaudu 4 mN/m võrra.

Parakoori arvutamiseks kasutatud struktuuripõhistest kirjandusest leitud erinevatest meetoditest on kõige täpsem Quayle poolt 1953. aastal välja pakutud aatomite ja gruppide parakooride väärtused. Kuid ka selle meetodi kasutamisel on keskmine pindpinevuste erinevus katseliselt leitud väärtustest üle 2 mN/m. Üldine järeldus parakooride kasutamise kohta on järgmine:

- Struktuuri kaudu aatomite ja gruppide parakooride abil ainetele arvutatud parakooridest leitud pindpinevuse väärtusi ei saa kasutada fenoolsete ühendite pindpinevuse leidmiseks, kuna ükski kirjanduses pakutud meetod ei anna täpset vastet, sest ei suuda õigesti arvesse võtta OH-rühma mõju.

Kuna struktuuripõhiselt saadud parakoori abil leitud pindpinevused on üsna ebatäpsed, on mõistlik kasutada empiirilist lähendust, mis võiks anda täpsema parakoori ja pindpinevuse väärtuse. Joonisel 28 on toodud katseliselt leitud pindpinevuste väärtustest võrrandi 2.12 abil arvutatud parakoori väärtused alkaanidele, alküülbenseenidele, fenoolsetele ühenditele ja kahealuselistele benseeni derivaatidele. Joonisel 28 olevate punktide põhjal on koostatud tabel 22, kuhu on välja toodud tõusunurk ja algordinaat parakoori leidmiseks, sõltuvalt ainegrupist.



Joonis 28. Parakoori sõltuvus molaarmassist

Tabelist 22 näeb, et alkaanide puhul on tõusunurk kõige suurem ja ainete puhul, mis sisaldavad kaht OH-rühma, kõige väiksem. Algoridinaatide puhul on näha tendents, et ainegruppide puhul, kus on sees OH-rühm, on väärtus negatiivne ja ainerühmade puhul, kus OH-rühma sees pole, on algoridinaadi väärtus positiivne.

Tabel 22. Erinevate ainegruppide tõusunurgad ja algoridinaadid

Ainegrupp	Tõus	algoridinaat	M, g/mol
Alkaanid	2,8718	19,99	16,04-114,23
Alküülbenseenid	2,6174	35,97	78,11-106,17
1xOH-rühm	2,6679	-27,21	94,11-234,38
2xOH-rühm	2,5480	-38,67	110,11-193,26

Üldiselt, fenoolsetele ühenditele leitud võrrandi rakendamisel saadud pindpinevuste väärtused olid täpsemad võrreldes arvutamismeetoditega leitud pindpinevuse väärtustega. Siiski, andmete vähesuse tõttu tuleks korrelatsiooni täiendavalt hinnata lisaandmetega.

4. Kokkuvõte

Pindpinevus on vedelike molekulide omadus, mida kasutatakse massivahetusprotsesside seadmete, nagu destillatsioonikolonni või absorptsioonikolonni projekteerimisel. Lisaks kasutatakse pindpinevust ka reostuse korral aine leviku kiiruse hindamisel.

Käesolevas töös uuriti pindpinevust – mis on pindpinevus, kuidas see sõltub temperatuurist, aine struktuurist ja süsinikuahela pikkusest. Töös oli lisaks kirjandusülevaatele ka eksperimentaalne pool. Katselises osa eesmärgiks oli uurida, kuidas muutuvad väheuuritud fenoolsete ühendite pindpinevused temperatuuri ning molaarmassi ja struktuuri muutudes.

Selleks hinnati eelnevalt kasutatava pindpinevuse mõõtmise meetodika mõõtetäpsust. Seda tehti kasutades võrdlusaineid – vett, o-ksüleenit, tolueni, klorobenseeni ja heptaani. Katseliselt saadud pindpinevuse väärtused ja kirjandusest leitud võrdlusandmed pindpinevusele langesid hästi kokku – see lisab usaldusväärsust mõõtmistel saadud fenoolsete ühendite pindpinevuse väärtustele.

Katselises pooles saadud tulemused on usutavad, kuna allusid kirjanduslike andmete analüüsil saadud hüpoteesidele. Kõige kõrgem oli mõõdetud ainetest pindpinevus fenoolil ning kõige madalam 2,4-ditertamüülfenoolil. Samuti olid mõõdetud fenoolsete ühendite pindpinevuse väärtused sarnased kirjanduses leitud võrdlusandmetega. Alkaanide ja alküülbenseenide korral kehtib seaduspärasus, et molaarmassi kasvades kasvab ka pindpinevuse väärtus. Fenoolsete ühendite puhul ilmnes sellele vastupidine tendents. Andmetes tuli välja ka trend, et sarnaste molaarmassidega ainete puhul on oluline, kus paikneb kõrvalahel – võrdsete molaarmassidega ainetest oli pindpinevus suurem ühendil, mille kõrvalahel asus orto-asendis ja väikseim ühendil, mille kõrvalahel paiknes para-asendis.

Katseliste pindpinevuste väärtuste võrdlus kirjanduses pakutud aatomite ja gruppide parakooride väärtustest leitava aine parakoori abil arvatud pindpinevuste väärtustega selgus, et parakoori abil leitud pindpinevused on tunduvalt kõrgemad. Seega olemasolevad aatomite ja gruppide parakooride väärtuste abil ei ole võimalik leida usaldusväärset fenoolsete ühendite pindpinevuse väärtust.

5. Abstract

Surface tension is a property of liquids which is used in building equipment for mass transfer processes, such as distillation columns and absorption columns. In addition, surface tension is used for evaluating the spreading rate of pollution in the environment.

In this paper surface tension was analysed – what is it, how does it depend on temperature, the structure of the compound and the length of the hydrocarbon chain of the compound. In addition to literature data, there is experimental data in this work. The main goal of the experimental side was to analyze how the surface tension of phenolic compounds changes with temperature and the molecular weight of the compound.

Before performing measurements the accuracy of measuring method was analyzed. For that there were some reference compounds, such as water, o-xylene, toluene, chlorobenzene and heptane. Tests with those compounds show that the measuring method is reliable, because test results are highly comparable to the data found from literature. This fact adds reliability to the results gained from measuring phenolic compounds.

The results from measuring the phenolic compounds are believable. They were in agreement with the hypothesis made based on literature data. The highest surface tension was measured for phenol and the lowest for 2,4-ditertamylphenol. The results from measuring the phenolic compounds and the data found from literature were comparable. For alkanes and alkylbenzenes there is a general trend that surface tension grows with molecular mass, but in phenolic compounds the tendency was the other way around. For phenolic compounds the measurements and data gained from literature showed that surface tension increased as the molecular weight of the compound decreased. Also, there was another trend that showed the location of side chains has an important effect on surface tension. For compounds with equal molecular weights the surface tension was higher if the side chain was located at the ortho-position and lower if the side chain was in the para-position.

Comparison of experimental surface tension values to those calculated using atomic and group parachores, revealed that using parachor does not give reliable values for the surface tensions of phenolic compounds.

6. Lisa

6.1 Mõõtmisprotseduur

Katsed viidi läbi järgides kahte erinevat viisi, sõltuvalt kas aine oli toatemperatuuril tahkel või vedeliku kujul. Tahke aine mõõtmiseks oli tarvilik kasutada soojendatavat süstalt (joonis 29), kuid vedeliku vormis olnud aine mõõtmiseks oli sobilikum tavaline süstal (joonis 30). Üldjoontes olid mõlemad viisid sarnased, kuid tahke aine mõõtmiseks tuli teha lisasamme.

- Mõõtmisprotseduur, kui aine oli toatemperatuuril tahke, oli järgmine:
 - Täita kuumutatav süstal uuritava tahke ainega
 - Asetada süstal soojendatavasse pessa
 - Kuumutada pesa aine sulamistemperatuurini
 - Sulgeda kuumutatav süstlasüsteem
 - Asetada süstal mõõtekambrisse
 - Jälgida, et mõõtekambris olevad termopaar ja nõel oleksid samal tasandil
 - Fokuseerida nõel ja termopaar
 - Avada lämmastikukraan ja juhtida lämmastik läbi mõõtekambri
 - Kuumutada mõõtekamber pisut kõrgemale temperatuurile kui soojendatav süstlasüsteem
 - Reguleerida lämmastiku siseneva voo temperatuur võrdseks mõõtekambri temperatuuriga
 - Oodata kui mõõtekambris ja siseneva lämmastiku voo temperatuurid stabiliseeruvad
 - Teostada mõõtmised (minimaalselt 5 kordust)
 - Muuta süstla, lämmastiku voo ja mõõtekambri temperatuurid ja oodata kuniks need stabiliseeruvad
 - Teostada mõõtmised (minimaalselt 5 kordust)
 - Korrata protseduuri



Joonis 29. Kuumutatav süstal

- Mõõtmisprotseduur, kui aine oli toatemperatuuril vedel, oli järgmine:
 - Täita süstal uuritava ainega
 - Asetada süstal mõõtekambrisse
 - Jälgida, et mõõtekambris olevad termopaar ja nõel oleksid samal tasandil
 - Fokuseerida nõel ja termopaar
 - Avada lämmastikukraan ja juhtida lämmastik läbi mõõtekambri
 - Reguleerida mõõtekambri temperatuur
 - Reguleerida lämmastiku siseneva voo temperatuur võrdseks mõõtekambri temperatuuriga
 - Oodata kui mõõtekambris ja siseneva lämmastiku voo temperatuurid stabiliseeruvad
 - Teostada mõõtmised (minimaalselt 5 kordust)
 - Muuta lämmastiku voo ja mõõtekambri temperatuurid ja oodata kuniks need stabiliseeruvad
 - Teostada mõõtmised (minimaalselt 5 kordust)
 - Korrata protseduuri



Joonis 30. Süstal toatemperatuuril vedelate proovide jaoks

6.2 Lisatabelid ja -joonised

Tabel 23. Vee katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus

Temperatuur, °C	Katseline, mN/m	Vargaftik et al., 1983, mN/m
20	72,53	72,81
30	70,92	71,13
40	69,31	69,45
50	67,70	67,77
60	66,09	66,09
70	64,48	64,42
80	62,87	62,74
90	61,26	61,06

Tabel 24. Erinevus katseliselt saadud vee pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel

Temperatuur, °C	Absoluutväärtus katselise ja A vahel, mN/m
20	-0,28
30	-0,21
40	-0,14
50	-0,07
60	-0,01
70	0,06
80	0,13
90	0,20

A - Vargaftik et al., 1983

Tabel 25. O-ksüleeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus

Temperatuur, °C	Katseline, mN/m	Chen et al, 2007, mN/m	Jasper, 1972, mN/m
20	29,80	30,06	30,31
30	28,76	28,96	29,21
40	27,71	27,87	28,11
50	26,66	26,78	27,00
60	25,61	25,68	25,90
70	24,56	24,59	24,80
80	23,52		23,70
90	22,47		22,60
100	21,42		21,50

Tabel 26. Erinevus katseliselt saadud o-ksüleeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel

Temperatuur, °C	Absoluutväärtus katselise ja A vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja B vahel, mN/m
20	-0,25	-0,51
30	-0,21	-0,45
40	-0,16	-0,40
50	-0,12	-0,34
60	-0,07	-0,29
70	-0,02	-0,24
80		-0,18
90		-0,13
100		-0,08

A - Chen et al, 2007; B - Jasper, 1972

Tabel 27. Tolueeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus

Temperatuur, °C	Katseline, mN/m	Kahl et al., 2003, mN/m	Jasper, 1972, mN/m
20	28,05	28,31	28,52
30	26,96	27,16	27,33
40	25,87	26,01	26,15
50	24,79	24,86	24,95
60	23,70	23,71	23,77

Tabel 28. Erinevus katseliselt saadud tolueeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel

Temperatuur, °C	Absoluutväärtus katselise ja A vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja B vahel, mN/m
20	-0,26	-0,47
30	-0,20	-0,37
40	-0,14	-0,28
50	-0,07	-0,16
60	-0,01	-0,07

A - Kahl et al., 2003; B - Jasper, 1972

Tabel 29. Klorobenseeni katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus

Temperatuur, °C	Katseline, mN/m	Körösi ja Kovats, 1981, mN/m	Jasper, 1972, mN/m	Kremann et al., 1914, mN/m
20	32,95	32,96	33,59	33,10
30	31,77	31,8	32,4	32,08
40	30,58	30,64	31,21	31,06
50	29,40	29,48	30,01	30,04
60	28,22	28,32	28,82	29,02
70	27,04	27,16	27,63	27,99
80	25,86	26,00	26,44	26,97

Tabel 30. Erinevus katseliselt saadud klorobenseeni pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel

Temperatuur, °C	Absoluutväärtus katselise ja A vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja B vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja C vahel, mN/m
20	-0,01	-0,64	-0,16
30	-0,04	-0,63	-0,32
40	-0,06	-0,63	-0,48
50	-0,08	-0,61	-0,64
60	-0,10	-0,60	-0,80
70	-0,12	-0,59	-0,96
80	-0,15	-0,59	-1,12

A – Körösi ja Kovats, 1981; B - Jasper, 1972; C - Kremann et al., 1914

Tabel 31. Heptaani katseliselt ja kirjandusest leitud pindpinevuste võrdlus

Temperatuur, °C	Katseline, mN/m	Queimada et al. 2003, mN/m	Jasper, 1972, mN/m	Jasper et al., 1953, mN/m	McLure et al., 1982, mN/m
20	20,16	20,50	20,14	20,28	20,21
30	19,18	19,47	19,17	19,27	19,17
40	18,20	18,42	18,18	18,25	18,19
50	17,22	17,41	17,2	17,24	17,18
60	16,25	16,42	16,22	16,22	16,19
70	15,27	15,32	15,24	15,21	15,18
80	14,29	14,41	14,26	14,19	14,18

Tabel 32. Erinevus katseliselt saadud heptaani pindpinevuse ja võrdlusandmete vahel

Temperatuur, °C	Absoluutväärtus katselise ja A vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja B vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja C vahel, mN/m	Absoluutväärtus katselise ja D vahel, mN/m
20	-0,34	0,02	-0,12	-0,05
30	-0,29	0,01	-0,09	0,01
40	-0,22	0,02	-0,05	0,01
50	-0,19	0,02	-0,02	0,04
60	-0,18	0,02	0,02	0,05
70	-0,05	0,03	0,06	0,09
80	-0,12	0,03	0,10	0,11

A – Queimada et al., 2003 B – Jasper, 1972 C – Jasper et al., 1953
D – McLure et al., 1982

Tabel 33. Katseliselt saadud fenooli pindpinevused

Temperatuur, °C	Pindpinevus, mN/m
44,2	38,12
49,9	37,01
60,3	36,29
68,9	35,05
71,4	34,60
77,2	34,31
100,8	31,47
104,6	30,72
129,3	27,57

Tabel 34. Katseliselt saadud 2,6-dimetüülfenooli pindpinevused

Temperatuur, ° C	Pindpinevus, mN/m
50,0	33,33
65,1	31,94
67,3	31,52
87,7	29,50
88,4	29,26
108,8	27,14
109,9	27,55
126,0	25,39

Tabel 35. Katseliselt saadud 2,3-dimetüülfenooli pindpinevused

Temperatuur, ° C	Pindpinevus, mN/m
78,7	31,47
79,7	31,96
99,2	29,96
104,2	28,89
113,2	28,18
120,1	27,47
129,6	26,32
131,1	25,47

Tabel 36. Katseliselt saadud 4-etüülfenooli pindpinevused

Temperatuur, ° C	Pindpinevus, mN/m
50,3	32,69
50,5	32,81
71,5	30,60
72,0	30,73
92,9	28,69
95,6	28,46
110,0	26,57
118,8	26,13
121,1	25,65
132,6	24,62
144,2	23,94

Tabel 37. Katseliselt saadud 2,4-ditertamüülfenooli pindpinevused

Temperatuur, ° C	Pindpinevus, mN/m
26,5	29,10
43,0	27,81
54,8	26,84
66,3	26,06
89,4	24,35
91,3	24,20
108,5	23,03
131,1	21,55
140,5	20,82

Tabel 38. Katselise ja kirjanduslike andmete o-ksüleeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures

Allikas	tõus	algordinaat	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,1034	33,031	25,276
Mumford & Philips, 1929	-0,1039	33,17	25,378
Vogel, 1948	-0,1061	33,873	25,916
katseline	-0,1039	31,785	23,993

Tabel 39. Katselise ja kirjanduslike andmete klorobenseeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures

Allikas	tõus	algordinaat	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,1201	35,358	26,351
Mumford & Philips, 1929	-0,1225	36,058	26,871
Vogel, 1948	-0,1243	33,873	24,551
katseline	-0,1210	36,59	27,515

Tabel 40. Katselise ja kirjanduslike andmete toluueeni parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures

Allikas	tõus	algordinaat	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,1192	31,096	22,156
Mumford & Philips, 1929	-0,1178	30,743	21,908
Vogel, 1948	-0,1207	31,502	22,450
katseline	-0,1087	30,222	22,070

Tabel 41. Katselise ja kirjanduslike andmete heptaani parakoori tõusunurgad ja väärtus 75 °C juures

Allikas	tõus	algordinaat	pindpinevus 75 °C juures
Sugden, 1924	-0,0884	21,008	14,378
Mumford & Philips, 1929	-0,0927	22,01	15,058
Vogel, 1948	-0,0934	22,18	15,175
katseline	-0,0978	22,113	14,778

7. Kasutatud kirjandus

"Surface and Interfacial Tension". Langmuir-Blodgett Instruments (22.03.2012)

(<http://zsm.umcs.lublin.pl/Wyklad/FGF-Ang/2A.F.G.F.%20Surface%20tension.pdf>, 30.04.2015)

A Textbook Physical Chemistry, page 96

A. Goel, Surface Chemistry, 2006, page 245

Adamson, Arthur W.; Alice P. Gast (1997). Physical Chemistry of Surfaces (6th ed.). Wiley Interscience.

B. E. Poling, J. M. Prausnitz ja J. P. O'Connell (2001). Properties of liquids and gases

C. A. Buehler , J. H. Wood , D. C. Hull , E. C. Erwin, J. Am. Chem. Soc., 1932, 54 (6), pp 2398–2405

Charles M. Hansen (2007) SURFACE CHARACTERIZATION USING HANSEN SOLUBILITY (COHESION) PARAMETERS.. Proceedings of the 28th Risø International Symposium on Materials Science. 191-197

Chen, Z.; Ma, P.; Xia, S.; Yin, D. Surface Tension of o-Xylene + Acetic Acid and m-Xylene + Acetic Acid Binary Mixtures from 303.15 K to 343.15 K. J. Chem. Eng. Data, 2007, 52, 454-457

Gabor Körösi, E. sz. Kovats; Density and surface tension of 83 organic liquids; J. Chem. Eng. Data 1981, 26, 323-332

Heike Kahl, Tino Wadewitz , and Jochen Winkelmann. J. Chem. Eng. Data, 2003, 48 (3), pp 580–586

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Phenol-2D-skeletal.png>, 06.04.2015

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Phenol-2D-skeletal.png>, 06.04.2015

<http://folk.uio.no/fhansen/dropbroc.html>, 16.04.2015

<http://folk.uio.no/fhansen/Image39.gif>, 16.04.2015

http://fusedglass.org/imgs/02_surface_tension.jpg, 10.03.2012

[http://lauda.de/hosting/lauda/webres.nsf/urlnames/graphics_tvt2/\\$file/Tensio-dyn-meth-e.pdf](http://lauda.de/hosting/lauda/webres.nsf/urlnames/graphics_tvt2/$file/Tensio-dyn-meth-e.pdf), 20.03.2012

http://pubs.rsc.org/services/images/RSCpubs.ePlatform.Service.FreeContent.ImageService.svc/ImageService/Articleimage/2014/SM/c3sm51943k/c3sm51943k-f4_hi-res.gif, 08.04.2015

<http://soft-matter.seas.harvard.edu/images/9/9b/Bubble.png>, 16.04.2015

http://static.coleparmer.com/large_images/AGROS11652.jpg, 07.04.2015

<http://web.mst.edu/~gbert/SurfaceTension/back.htm>, 30.04.2015

<http://www.ajbpr.com/issues/volume1/issue3/p33.pdf>, 15.05.2015

http://www.answers.com/Q/What_is_parachor_value_of_toluene, 15.05.2015

<http://www.caslab.com/Chemical-Search/Chemical-Structure/120-95-6.gif>, 06.04.2015

<http://www.caslab.com/Chemical-Search/Chemical-Structure/576-26-1.gif>, 07.04.2015

<http://www.caslab.com/Chemical-Search/Chemical-Structure/576-26-1.gif>, 07.04.2015

http://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB2106353.htm, 06.04.2015

http://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB6286516.htm, 06.04.2015

http://www.chemicalbook.com/ProductMSDSDetailCB3443747_EN.htm, 07.04.2015

http://www.engineeringtoolbox.com/surface-tension-d_962.html, 10.05.2015

<http://www.firsttenangstroms.com/pdfdocs/STPaper.pdf>, 16.04.2015

<http://www.me.iastate.edu/files/2011/10/152SemiBatchBCsch.gif>, 05.05.2015

http://www.nikhef.nl/~h73/kn1c/praktikum/phywe/LEP/Experim/1_4_05.pdf, 16.03.2012

<http://www.ramehart.com/pdf/260.pdf>, 22.04.2015

<http://www.sigmaaldrich.com/medium/structureimages/93/mfcd00002393.png>, 06.04.2015

<http://www.wolframalpha.com>,22.05.2012

I McLure, J Sipowska, I Pegg; *J. Chem. Thermodyn.*, 14 (1982), pp. 733–741

J Jasper, E Kerry, F Gregorich; *J. Am. Chem. Soc.*, 75 (1953), pp. 5252–5254

J Jasper; *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1 (4) (1972), pp. 841–948'

M.R. Riazi, *Characterization and Properties of Petroleum Fractions*. First Edition, 2005

N.B. Vargaftik, B. N. Volkov, and L.D.Voljak. *International Tables of the Surface Tension of Water*, 1983

Osborne r. Quayle. *The parachors of organic compounds. An Interpretation and Catalogue*. page 484 (1953)

Padday, J. F., Pitt, A. R., Pashley, R. M.,1974, "Menisci at a free liquid surface: surface tension from the maximum pull on a rod",*J. Chem. Soc., Far. Trans. I*, 71(10), 1919–1931 (1974)

PVT and Phase Behaviour Of Petroleum Reservoir Fluids, page 355

Queimada, J. A.; Silva, F. A. E.; Caço, A. I.; Marrucho, I. M.; Coutinho, J. A. P. Measurement and modeling of surface tensions of asymmetric systems: heptane, eicosane, docosane, tetracosane and their mixtures. *Fluid Phase Equilib.* 2003, 214, 211–221

Robert Kremann, Rudolf Meingast; Über die Energieänderungen binärer Systeme. III. Die Oberflächenspannungen binärer Gemische; *Monatshefte für Chemie*, 35, 10, 1914, pp 1323-1364.

Sameer Dixit, Arun K Sikarwar & Devendra Rodge. *Asian Journal of Biochemical and Pharmaceutical Research*, Issue 3 (Vol. 1) (2011)

William D. McCain (1990). *The Properties of Petroleum Fluids*. pp 334 – 337.