

UNIVERSITETI I PRISHTINËS “HASAN PRISHTINA”

FAKULTETI I SHKENCAVE MATEMATIKE-NATYRORE

DEPARTAMENTI I FIZIKËS



PUNIM I DIPLOMËS MASTER

“Vetitë volumetrike të përzierjeve binare që përfshijnë 1-propanol, toluene dhe anilinë në regjionin të temperaturave nga (293.15 deri 313.15) K”

Kandidati/ja:

Fatbardh Gashi

Mentori:

Prof. Asoc. Fisnik Aliaj

ABSTRAKTI

Ky punim prezanton një studim të detajuar mbi vetitë volumetrike të përzierjeve binare që përfshijnë 1-propanol, toluen dhe anilinë në regjionin e temperaturave nga 293.15 K deri në 313.15 K dhe në presion atmosferik lokal. Studimi është i ndarë në tre komponentë kryesorë: matjet eksperimentale, analiza teorike dhe modelimi matematik.

Në aspektin eksperimental, janë matur densiteti (ρ) dhe shpejtësia (u) e për të gjitha përzierjet në regjionin e specifikuar të temperaturave. Këta parametra janë matur në temperaturat $T = (293.15, 303.15, \text{ dhe } 313.15)$ K nën presion atmosferik lokal duke përdorur instrumentin DSA5000 (Anton Paar, Austria, Graz). Instrumenti është kalibruar në mënyrë periodike me ujë ultra të pastër dhe ajër të thatë. Pasiguritë standarde të dendësisë dhe shpejtësisë së zërit, dhe temperaturës (sipas deklarimeve nga prodhuesi) janë të barabarta me $\pm 0.005 \text{ kg m}^{-3}$, $\pm 0.1 \text{ m/s}$, dhe respektivisht ± 0.01 K. Këto të dhëna eksperimentale janë përdorur për të llogaritur vëllimet molare shtesë (V_m^E) dhe kompresibilitetin isentropik shtesë (κ_S^E). Rezultatet tregojnë sjellje të ndryshme për secilin sistem binar, të cilat lidhen ngushtë me bashkëveprimet ndërmolekulare dhe efektet strukturore.

Përzierjet 1-propanol + toluen treguan vlera të V_m^E dhe κ_S^E që variojnë midis pozitive dhe negative, duke krijuar një sjellje sinusoidale, e cila lidhet me balancimin midis ndërprerjes së lidhjeve hidrogjenore, bashkëveprimeve të Londonit, dhe efekeve strukturore. Në rastin e përzierjeve 1-propanol + anilinë, vlerat e V_m^E dhe κ_S^E ishin negative përgjatë gjithë regjionit të temperaturave dhe përqendrimeve, duke sugjeruar krijimin e lidhjeve të forta hidrogjenore midis grupeve hidroksil dhe amino. Përzierjet anilinë + toluen, nga ana tjetër, treguan V_m^E dhe κ_S^E negative për shkak të bashkëveprimeve dipol-dipol dhe akomodimit të molekulave në struktura më të dendura.

Në aspektin teorik, janë përdorur polinomet Redlich-Kister për të modeluar të dhënat eksperimentale, duke ofruar një përfaqësim të saktë të vetive termodinamike shtesë. Modeli Jouyban-Acree është aplikuar për të korrelacionuar të dhënat në varësi të temperaturës dhe përbërjes, duke treguar vlera të larta të koeficientëve të përshtatshmërisë statistikore ($R^2 > 0.99$) dhe devijime standarde minimale. Ky model matematikor përdoret gjerësisht për të përfaqësuar me saktësi varësinë nga përbërja dhe temperatura të vetive të ndryshme fizikokimike të përzierjeve shumëkomponentëshe, si dendësia, shpejtësia e zërit, kompresibiliteti izentropik, vëllimi molar, viskoziteti, indeksi i thyerjes, për të përmendur disa prej tyre.

Interpretimi i devijimeve nga sjellja ideale është bërë duke u bazuar në tre lloje kryesore të kontribueseve: (i) efektet fizike, si forcat e shpërndarjes së Londonit, (ii) efektet kimike, si krijimi dhe prishja e lidhjeve hidrogjenore, dhe (iii) efektet strukturore, të cilat varen nga madhësia dhe forma molekulare e komponimeve.

Ky studim kontribuon në avancimin e kuptimit të bashkëveprimeve molekulare në përzierjet binare dhe ofron të dhëna të vlefshme për aplikime praktike në industri të ndryshme, si ajo kimike, farmaceutike dhe e ndarjes së substancave. Në fund, rezultatet janë të rëndësishme për optimizimin e proceseve industriale dhe për formulimin e tretësve më ekologjikë.

Fjalët kyçe: Densiteti, shpejtësia e zërit, vëllimet molare shtesë, indeksi i thyerjes, kompresibilitetin isentropik shtesë, përzierjet binare.

ABSTRACT

This study presents a detailed investigation of the volumetric properties of binary mixtures comprising 1-propanol, toluene, and aniline in the temperature range of 293.15 K to 313.15 K under local atmospheric pressure. The research focuses on three key components: experimental measurements, theoretical analysis, and mathematical modeling.

In the experimental phase, density (ρ) and speed of sound (u) were measured for all mixtures at the specified temperature range. These parameters were determined at $T = (293.15, 303.15, \text{ and } 313.15)$ K under local atmospheric pressure using the DSA5000 instrument (Anton Paar, Austria, Graz). The instrument was periodically calibrated with ultrapure water and dry air. The standard uncertainties of density, speed of sound, and temperature (as per the manufacturer's specifications) are $\pm 0.005 \text{ kg m}^{-3}$, $\pm 0.1 \text{ m/s}$, and $\pm 0.01 \text{ K}$, respectively. The experimental data were used to calculate excess molar volumes (V_m^E) and excess isentropic compressibilities (κ_S^E). The results revealed distinct behaviors for each binary system, closely linked to intermolecular interactions and structural effects.

The 1-propanol + toluene mixtures exhibited V_m^E and κ_S^E values ranging between positive and negative, forming a sinusoidal pattern. This behavior is attributed to the balance between hydrogen bond disruption, London dispersion forces, and structural effects. In the case of 1-propanol + aniline mixtures, V_m^E and κ_S^E values were negative across all studied temperatures and concentrations, indicating the formation of strong hydrogen bonds between hydroxyl and amino groups. Conversely, aniline + toluene mixtures showed negative V_m^E and κ_S^E values due to dipole-dipole interactions and denser molecular arrangements.

Theoretical analysis involved the application of Redlich-Kister polynomials to model the experimental data, providing an accurate representation of the excess thermodynamic properties. The Jouyban-Acree model was applied to correlate the data as a function of temperature and composition, yielding high statistical fit coefficients ($R^2 > 0.99$) and minimal standard deviations. This mathematical model is widely utilized to accurately represent the composition- and temperature-dependent behavior of various physicochemical properties in multicomponent mixtures, such as density, speed of sound, isentropic compressibility, molar volume, viscosity, and refractive index, among others.

Deviations from ideal behavior were interpreted based on three main contributors: (i) physical effects, such as London dispersion forces, (ii) chemical effects, such as hydrogen bond formation and disruption, and (iii) structural effects, depending on the size and shape of the molecular components.

This study advances the understanding of molecular interactions in binary mixtures and provides valuable data for practical applications in various industries, including chemical, pharmaceutical, and separation processes. Ultimately, the findings are crucial for optimizing industrial processes and designing more environmentally friendly solvents.

Keywords: *Density, speed of sound, excess molar volumes, refractive index, excess isentropic compressibility, binary mixtures.*