



# Επιστήμη Υλικών II (Θ)

## Ενότητα 3: Παράμετροι διαλυτότητας

Σταμάτης Μπογιατζής, επίκουρος καθηγητής  
Τμήμα Συντήρησης Αρχαιοτήτων & Έργων Τέχνης



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ  
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ  
2007-2013  
Πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Παράμετροι διαλυτότητας Hildebrand

- Οι παράμετροι διαλυτότητας Hildebrand για μια χημική ένωση προσδιορίζονται πειραματικά μέσω της εξάτμισής της,

- βάσει της σχέσης:  $\delta = \sqrt{c} = \sqrt{\frac{\Delta H - RT}{V}}$

όπου:

$c$  = Πυκνότητα ενέργειας συνοχής

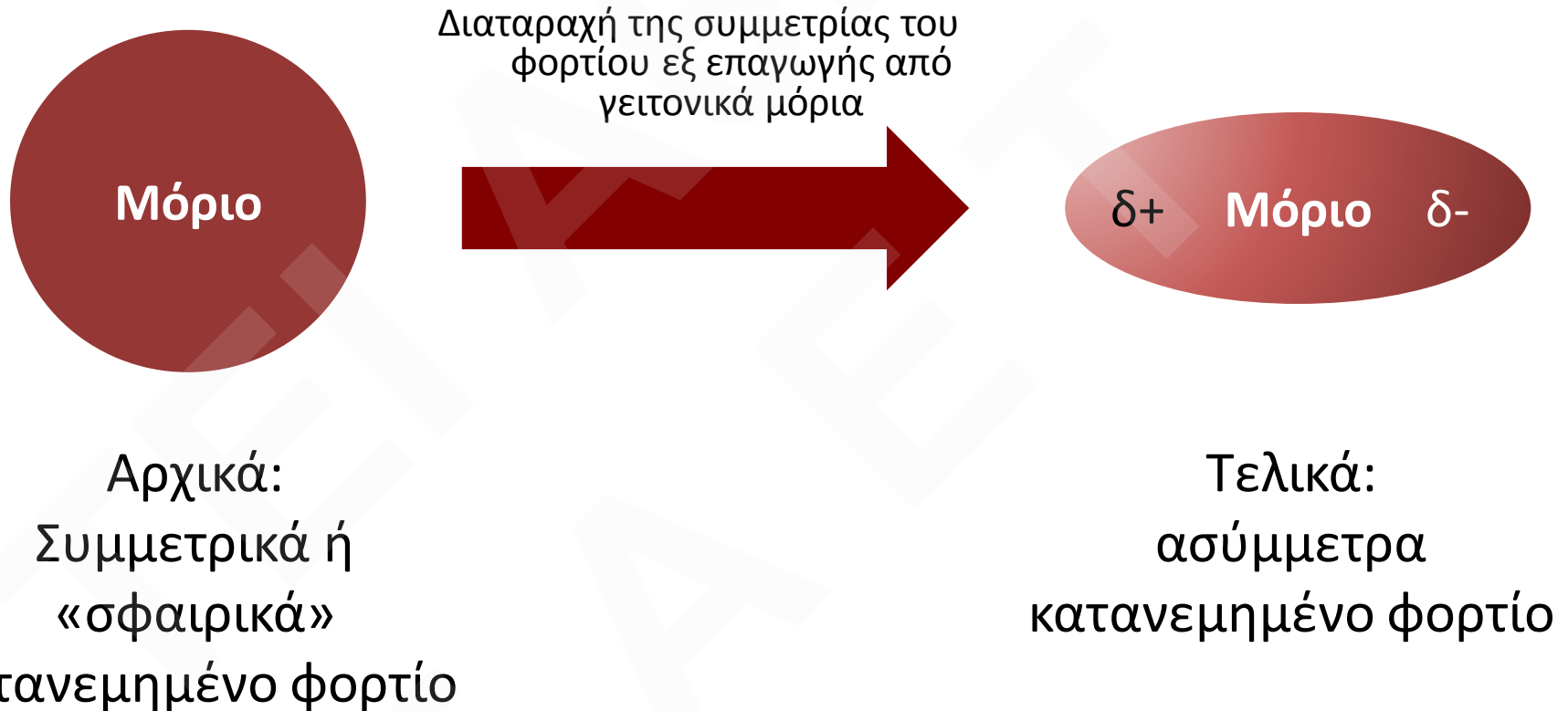
$\Delta H$  = θερμότητα εξαέρωσης

$R$  = παγκόσμια σταθερά των αερίων

$T$  = θερμοκρασία (Kelvin)

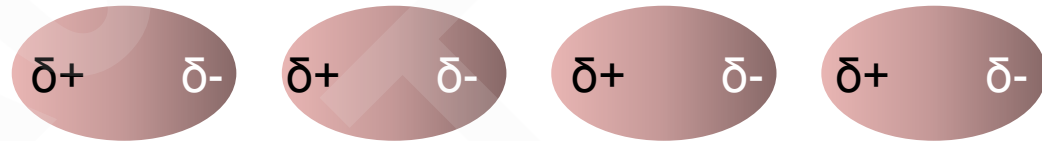
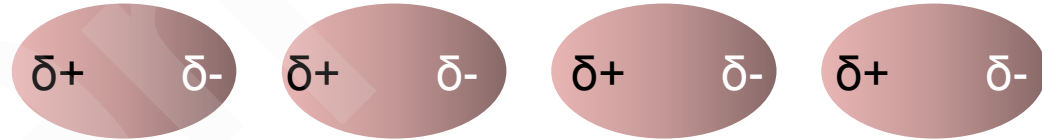
$V_m$  = μοριακός όγκος

# Εμφάνιση δυνάμεων διασποράς

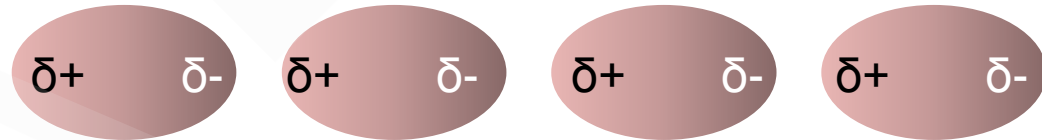
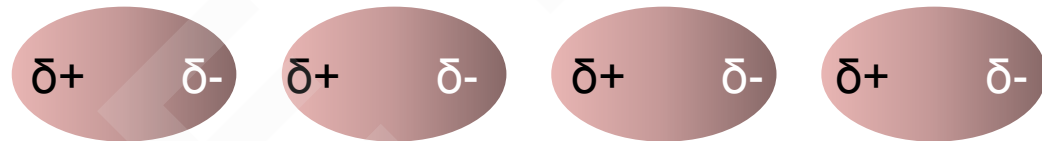


# Μόνιμα δίπολα (1 από 2)

- Στην άλλη άκρη του φάσματος υπάρχουν οι **δυνάμεις** που ασκούνται μεταξύ **μονίμων διπόλων**.

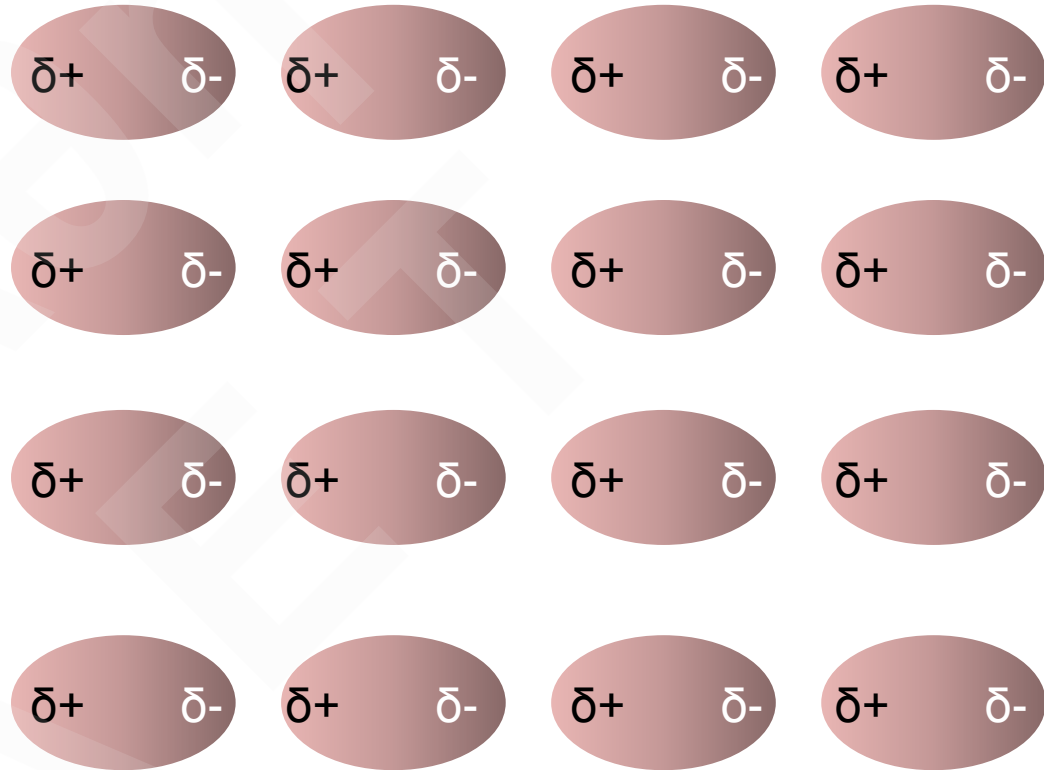


- Μόνιμα δίπολα εμφανίζονται σε μόρια των οποίων οι δεσμοί σχηματίζονται από άτομα με πολύ διαφορετική ηλεκτραρνητικότητα.



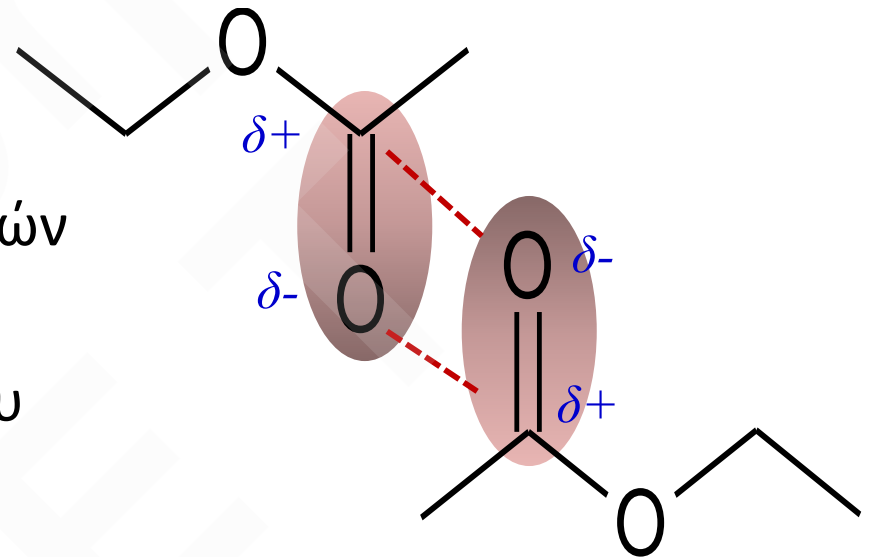
# Μόνιμα δίπολα (2 από 2)

- Κατά μήκος του διπόλου η κατανομή των φορτίων είναι **ασύμμετρη**.
- Οι έλξεις και απώσεις που ασκούνται κατευθύνουν τα μόρια να καταλαμβάνουν θέσεις κατάλληλου προσανατολισμού (π.χ. «κεφαλή με ουρά»).



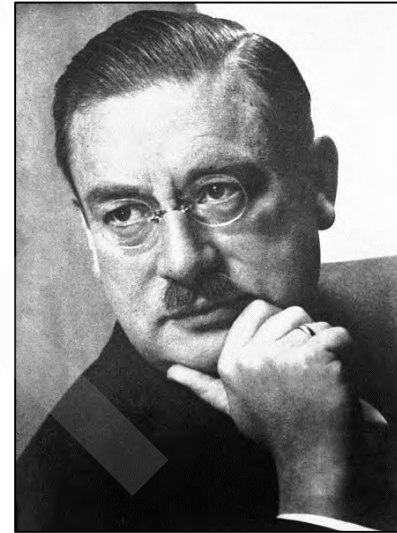
# Δυνάμεις Keesom

- Είναι ελκτικές δυνάμεις που εμφανίζονται μεταξύ **μονίμων διπόλων**.
- Η ασύμμετρη κατανομή ηλεκτρικών φορτίων οδηγεί στο σχηματισμό μονίμων ηλεκτρικών διπόλων που μπορούν και έλκουν αντίστοιχες περιοχές γειτονικών μορίων.
- Γενικά εμφανίζονται όταν στα μόρια υπάρχουν ομάδες με πολικό χαρακτήρα (π.χ. C=O, S=O, C≡N, C=N, κλπ.)

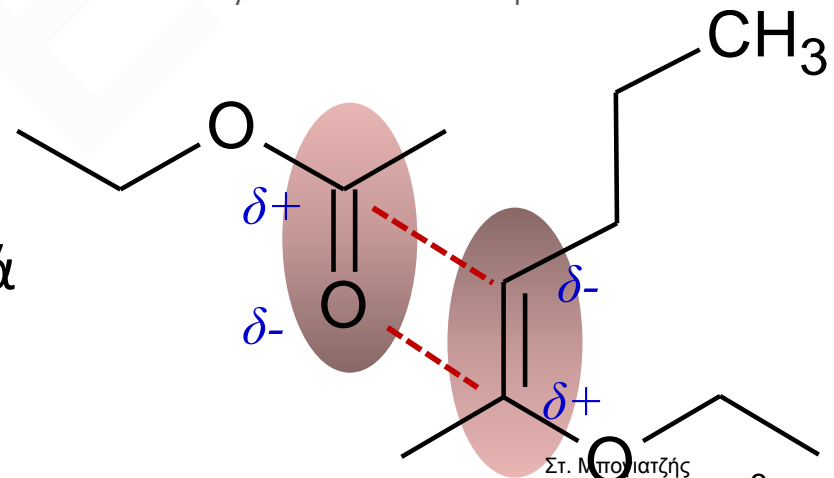


# Δυνάμεις Debye

- Εμφανίζονται μεταξύ διαφορετικών μορίων.
- Είναι δυνάμεις μεταξύ **μονίμων** διπόλων και διπόλων **εξ επαγωγής**.
- Πολλά μόρια, με ασύμμετρη κατανομή των ηλεκτρικών φορτίων, μπορούν από απόσταση να προκαλέσουν εμφάνιση διπόλων (=δίπολα εξ επαγωγής) σε γειτονικά μόρια, ή τμήματα μορίων με πιο συμμετρικά χαρακτηριστικά, ή **χωρίς πολικές ομάδες**.

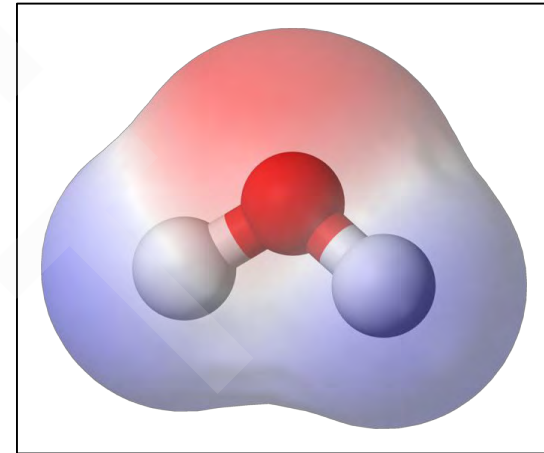


"Debye-boerhaave",  
by JdH available under public domain



# Δυνάμεις δεσμών υδρογόνου

- Σε μόρια που περιέχουν πολικούς δεσμούς που συνδέουν υδρογόνο και ηλεκτραρνητικό στοιχείο (O, N, F, Cl,) τα δίπολα είναι εξαιρετικά ισχυρά.
- Ως αποτέλεσμα, εξαιρετικά ισχυρές είναι και οι διαμοριακές δυνάμεις
- Σε αυτή την περίπτωση καλούνται «δεσμοί υδρογόνου».

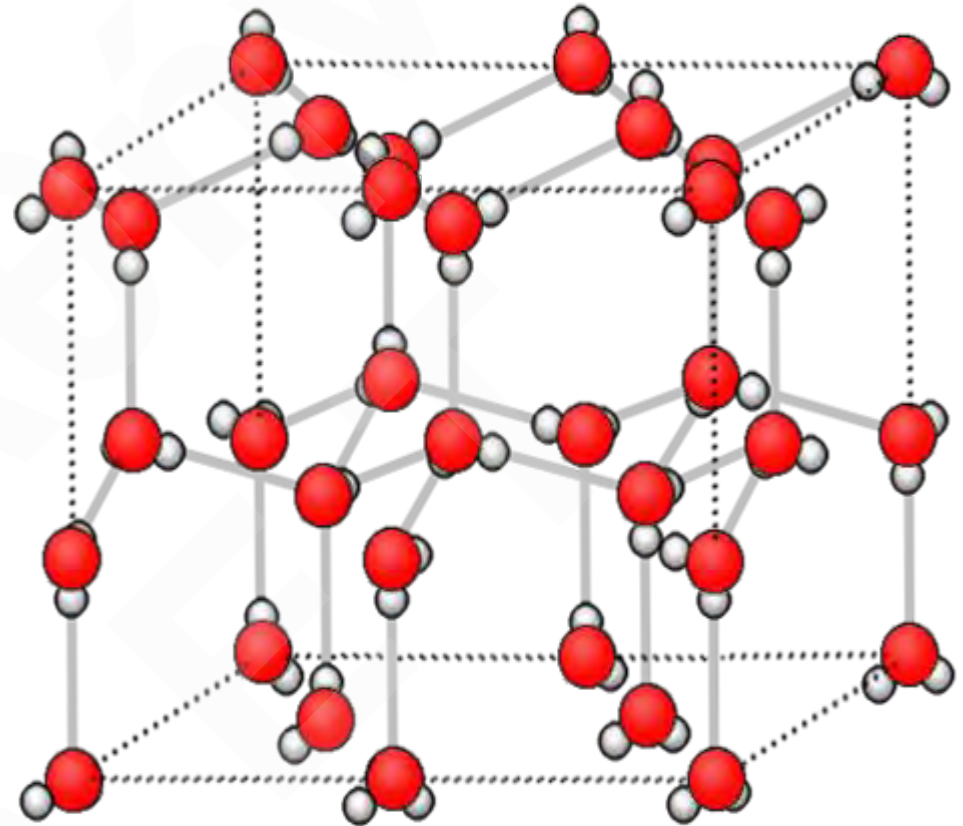


“[Water-elpot-transparent-3D-balls](#)”,  
by Benjah-bmm27 available under public domain



# Δεσμοί υδρογόνου στο νερό

Καθώς το νερό παγώνει, τα πολικά μόρια του νερού ευθυγραμμίζονται μεταξύ τους και τελικά καταλαμβάνουν σταθερές θέσεις σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα εξαγωνικής δομής. Το πλέγμα αυτό υπάρχει επειδή υπάρχουν οι δεσμοί υδρογόνου.



“冰晶结构”,

by IgniX available under [CC BY-SA 3.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/)

# Τι αποτέλεσμα έχουν οι δεσμοί υδρογόνου;

- Μια καλή εκτίμηση της ισχύος των δεσμών υδρογόνου μπορούμε να πάρουμε πάλι μέσω των **θερμοκρασιών βρασμού** των οργανικών ενώσεων.
- Η σύγκριση μεταξύ διαφορετικών ομολόγων σειρών μπορεί να μας δώσει και εκτίμηση για την συνεισφορά των δυνάμεων αυτών σε σύγκριση με τα άλλα είδη διαμοριακών δυνάμεων.

# Μεταξύ τι είδους μορίων εμφανίζονται οι δεσμοί υδρογόνου;

Οι δεσμοί υδρογόνου εμφανίζονται:

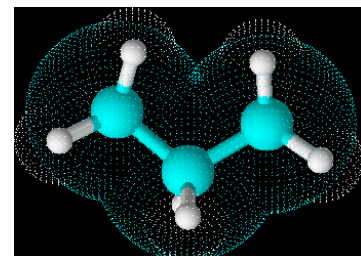
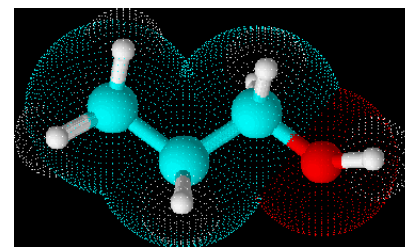
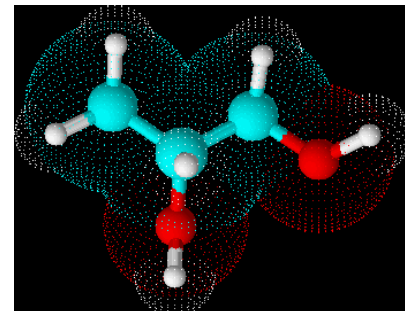
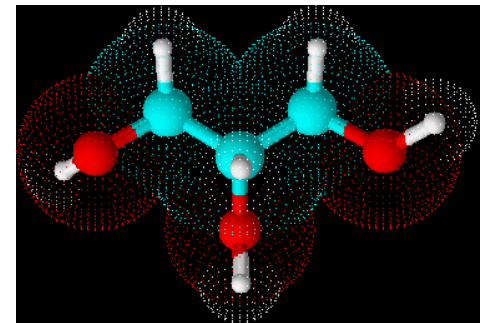
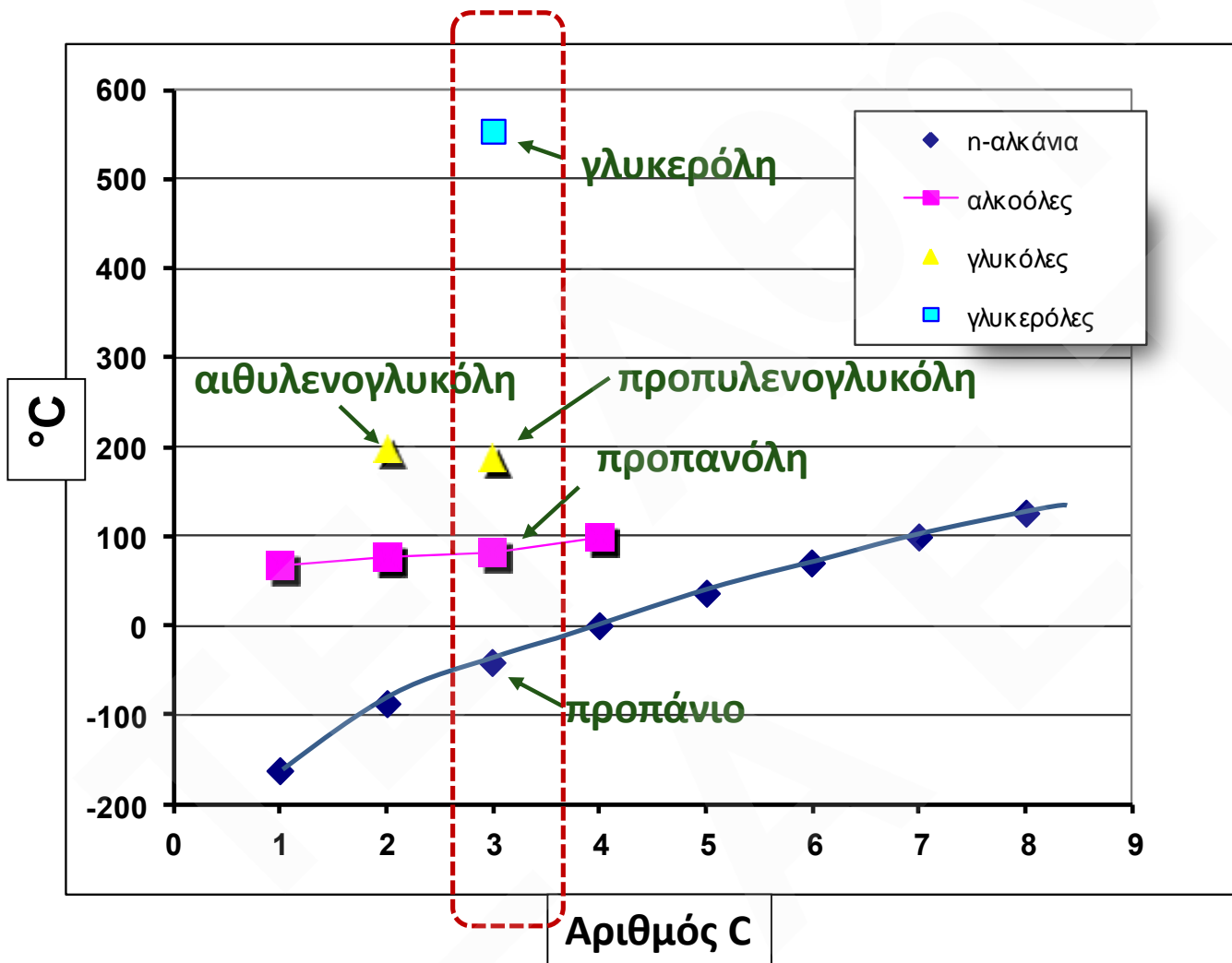
(α) μεταξύ μορίων που περιέχουν τις ομάδες



(β) Μεταξύ μορίων διαφορετικών ειδών που το ένα α' είδος είναι ένα από τα παραπάνω, ενώ το β' είδος μπορεί να περιλαμβάνει τις ομάδες

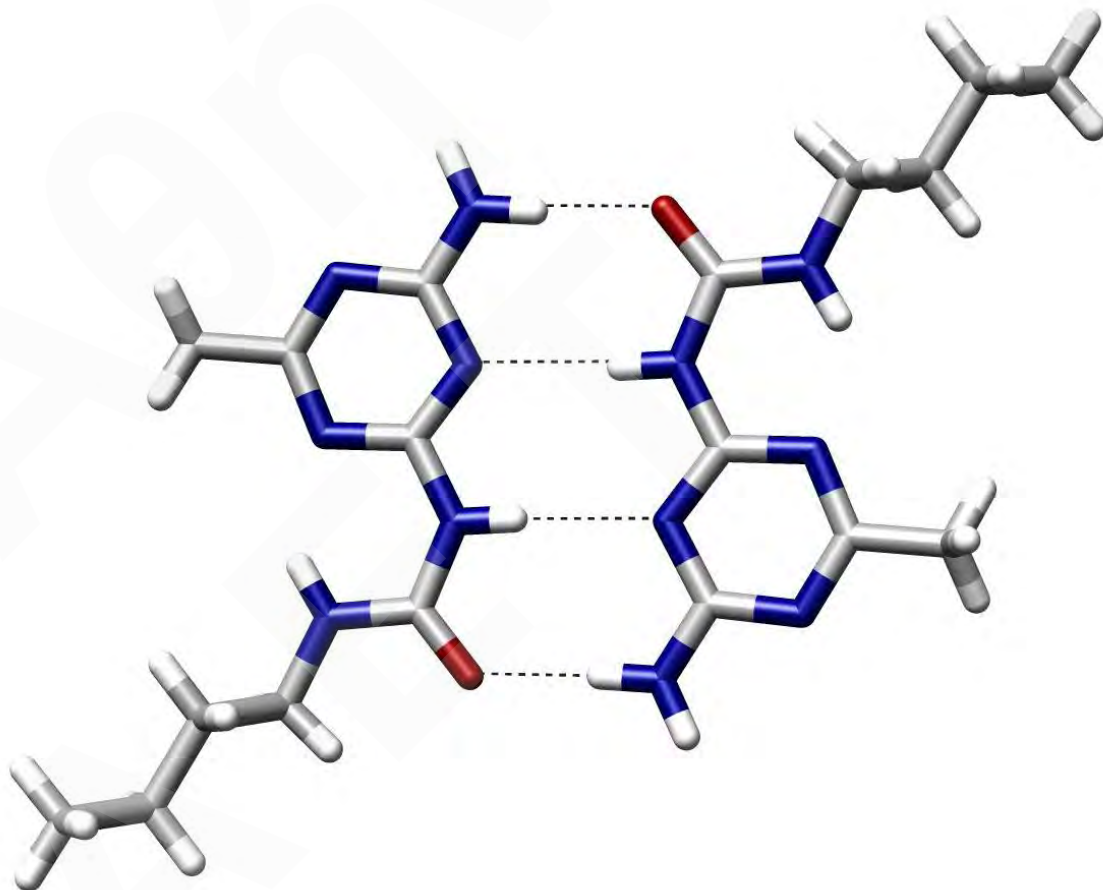


# Θερμοκρασίες βρασμού



# Πόσο ισχυροί είναι οι δεσμοί υδρογόνου; (1 από 2)

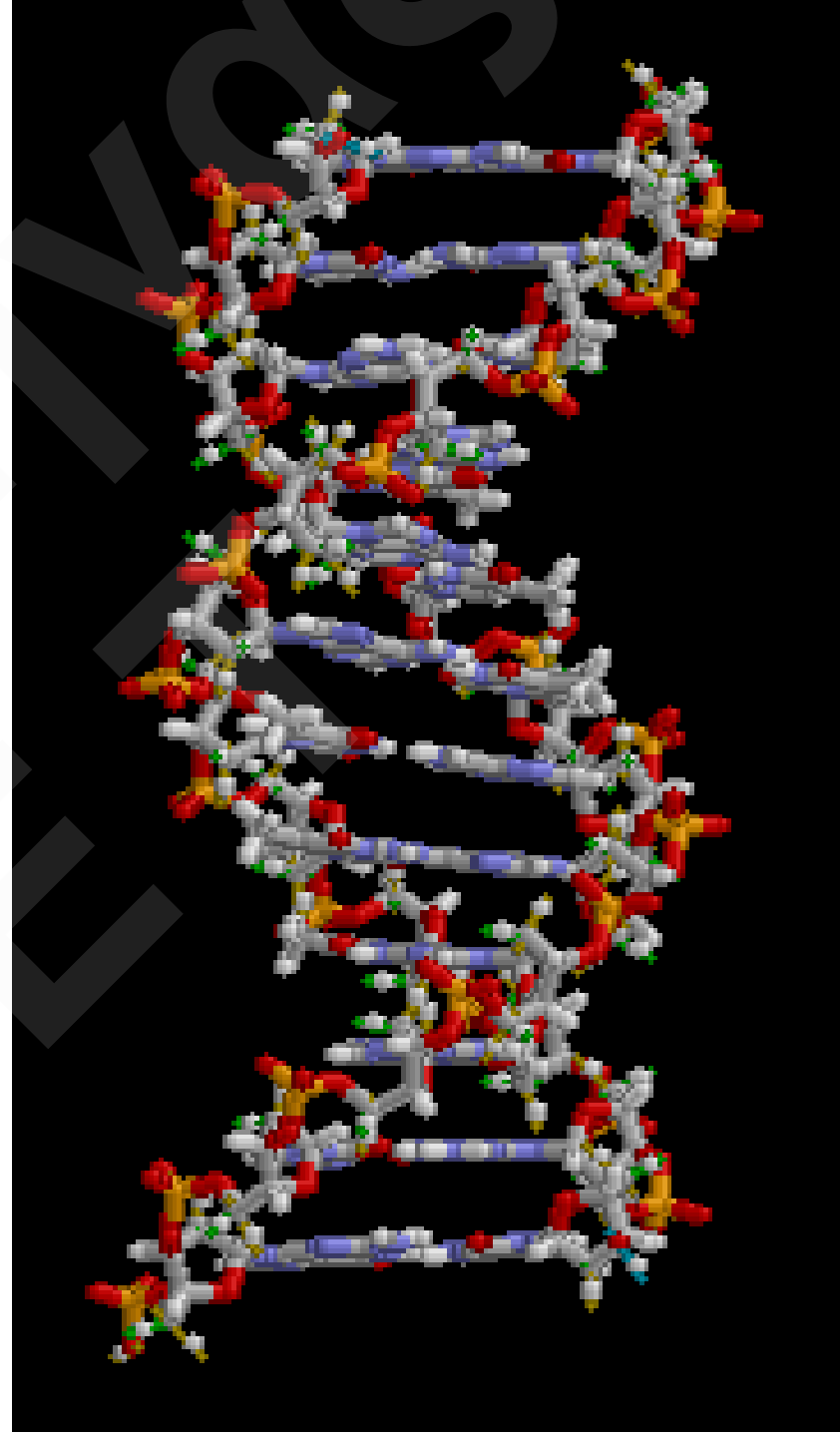
Είναι δυνατό να εμφανιστούν δεσμοί υδρογόνου σε πολλά σημεία ενός μορίου, με αποτέλεσμα να πολλαπλασιάζονται οι διαμοριακές έλξεις.



"Hydrogen Bond Quadruple AngewChemIntEd 1998 v37 p75", by M stone available under CC BY-SA 3.0

# Πόσο ισχυροί είναι οι δεσμοί υδρογόνου; (2 από 2)

Είναι δυνατό να εμφανιστούν δεσμοί υδρογόνου σε πολλά σημεία ενός μορίου, με αποτέλεσμα να πολλαπλασιάζονται οι διαμοριακές έλξεις.



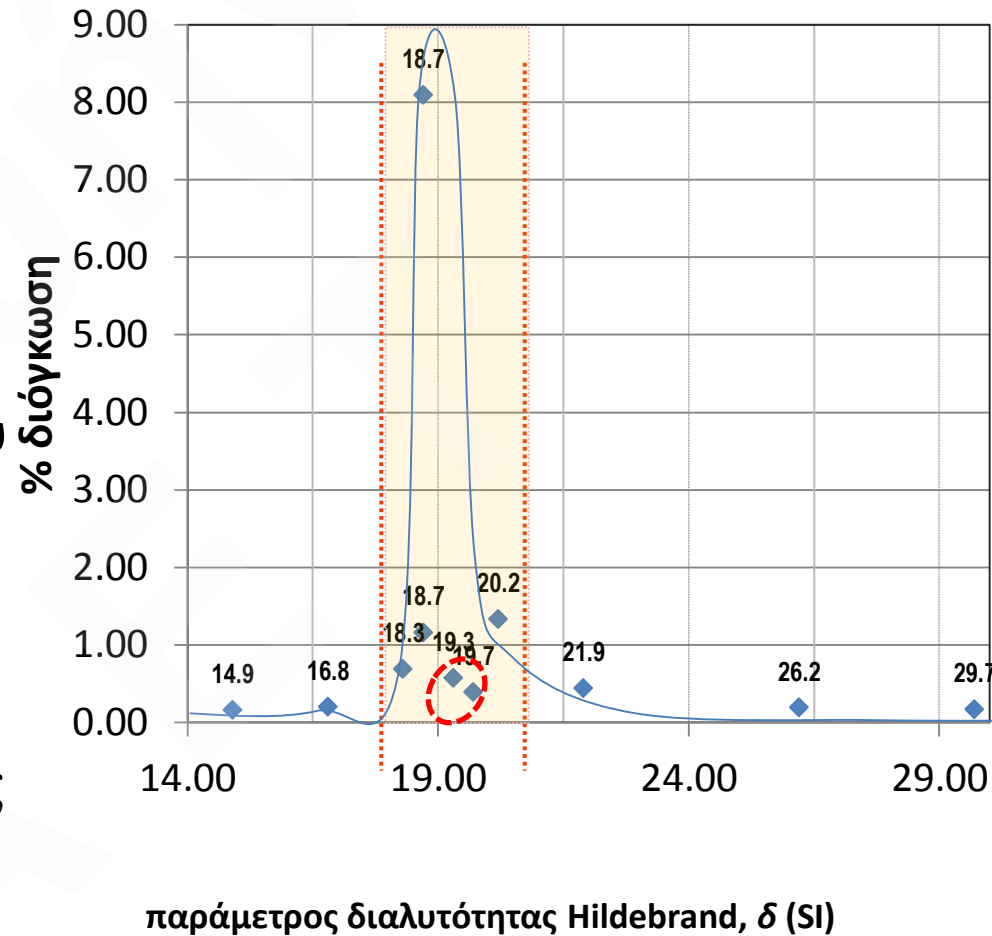
# Παράμετροι διαλυτότητας: χωρισμός σε 3 συνιστώσες

Οι δυνάμεις συνοχής μεταξύ μορίων μπορούν να χωριστούν σε τρία είδη :

- Δυνάμεις διασποράς (London),
- Δυνάμεις ξηρής πολικότητας (δυνάμεις Debye και Keesom),
- Δυνάμεις δεσμών υδρογόνου.

# Γιατί είναι καλύτερο το μοντέλο με διαχωρισμένες τις δυνάμεις συνοχής; (1 από 2)

- Είδαμε ότι η παράμετρος διαλυτότητας (Hildebrand)  $\delta$  μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένες προβλέψεις.
- Ο διαχωρισμός της παραμέτρου  $\delta$  σε τρεις επί μέρους συνιστώσες αυξάνει την **ακρίβεια** με την οποία μπορούμε να περιγράψουμε τις μοριακές δυνάμεις που ασκούνται μεταξύ των **συστατικών ενός διαλύματος**.



(Burke, J., Solubility Parameters and Application, *The Book and Paper Group, J. American Inst. for Conserv.*,



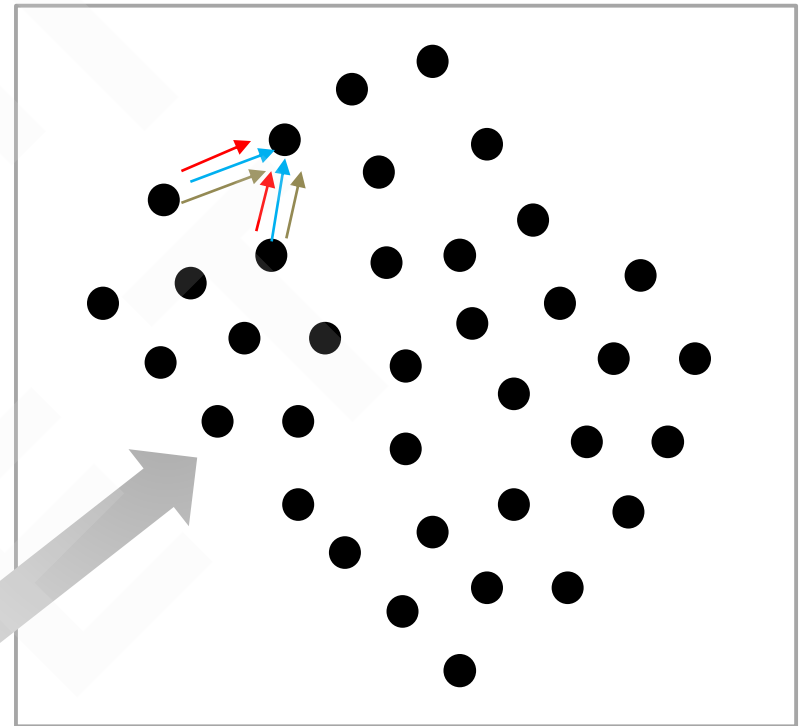
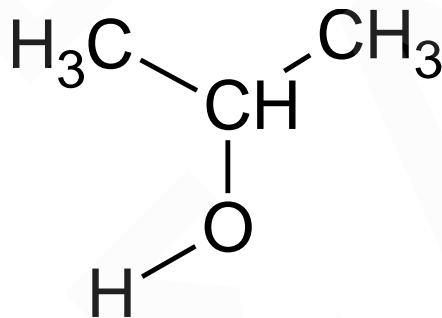
# Γιατί είναι καλύτερο το μοντέλο με διαχωρισμένες τις δυνάμεις συνοχής; (2 από 2)

Το μοντέλο των τριών επί μέρους παραμέτρων μπορεί να ερμηνεύσει :

- τη σύνδεση μεταξύ χρωστικής και συνδετικού μέσου,
- Τις μηχανικές ιδιότητες πολυμερών,
- Τη δράση των τασιενεργών μορίων.

# Όταν ασκούνται και τα τρία είδη δυνάμεων συνοχής

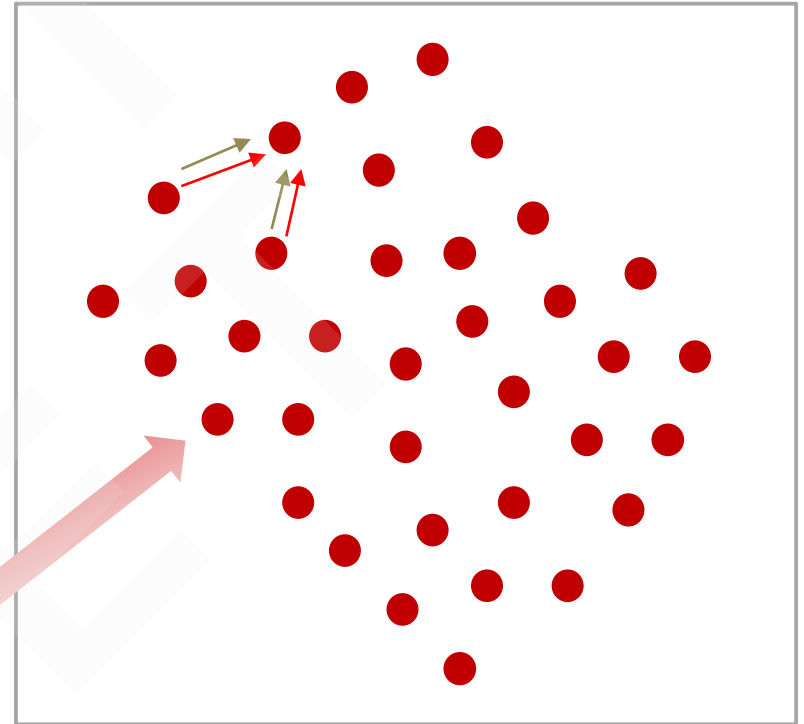
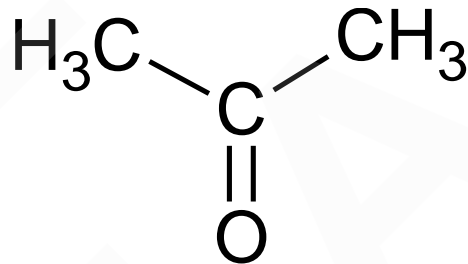
- Οι δυνάμεις συνοχής μεταξύ μορίων μπορούν να χωριστούν σε τρία είδη :
- **Δυνάμεις διασποράς (London),**
- **Δυνάμεις ξηρής πολικότητας,**
- **Δυνάμεις δεσμών υδρογόνου.**



Μεταξύ των μορίων της  
ισοπροπανόλης ασκούνται και  
τα τρία είδη δυνάμεων

# Όταν ασκούνται δύο είδη δυνάμεων συνοχής

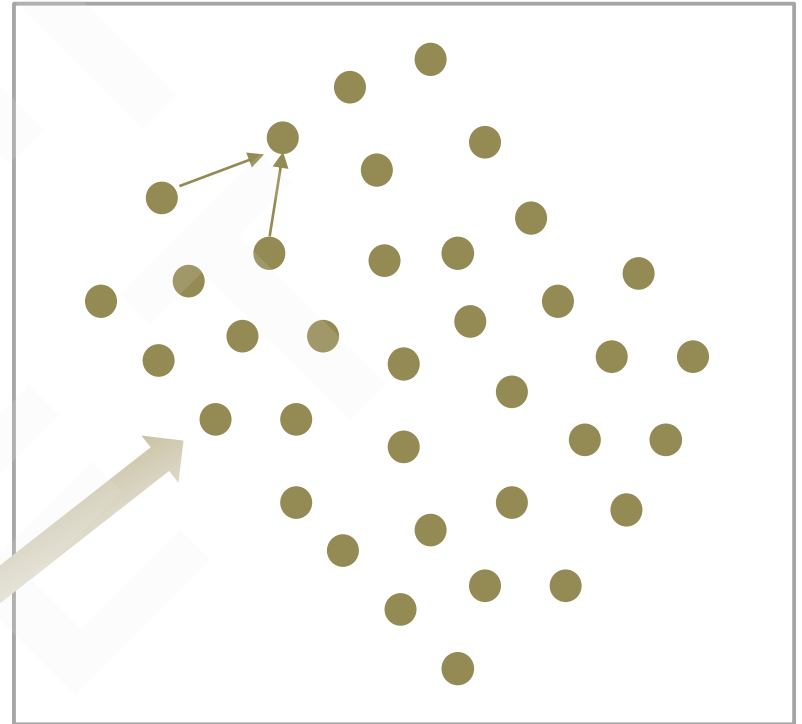
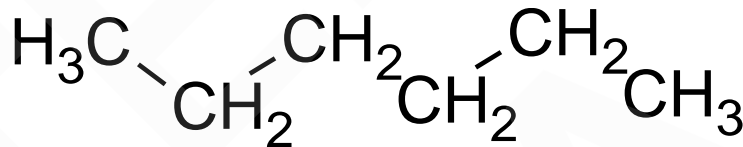
- Δυνάμεις διασποράς (London),
- Δυνάμεις ξηρής πολικότητας.



Μεταξύ των μορίων της ακετόνης ασκούνται δύο είδη δυνάμεων.

# Όταν ασκείται μόνο ένα είδος δυνάμεων συνοχής

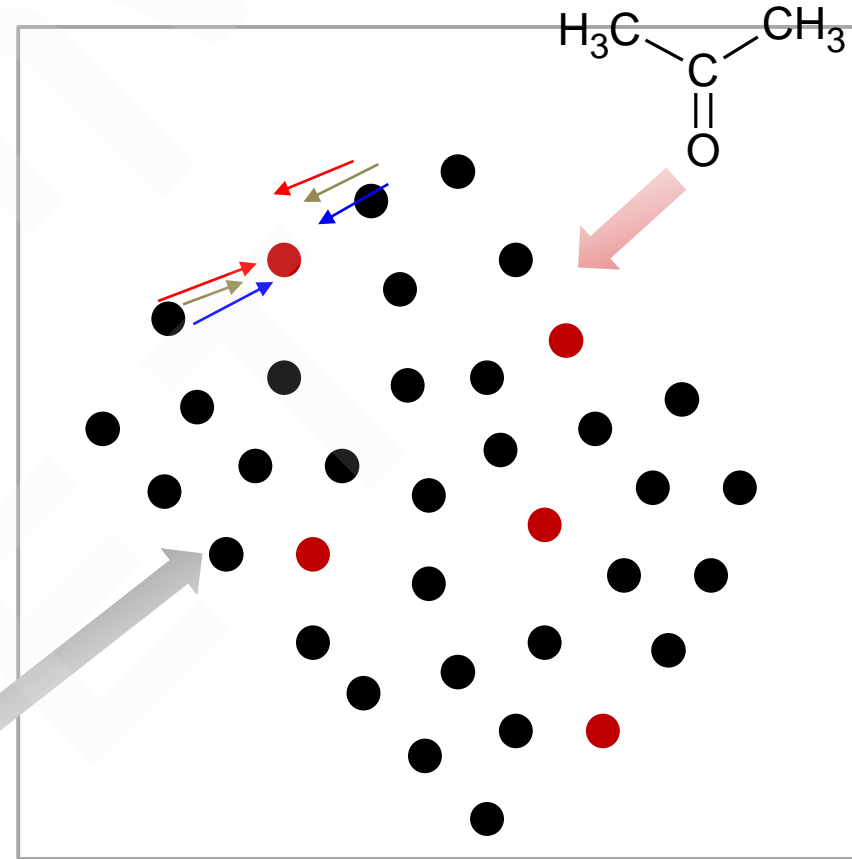
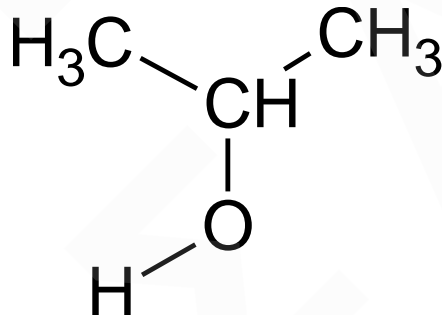
- Δυνάμεις διασποράς (London)



Μεταξύ των μορίων του εξανίου ασκείται ένα είδος δυνάμεων.

# Οι δυνάμεις μεταξύ διαφορετικών μορίων

- Μεταξύ διαφορετικών μορίων μπορούν να ασκηθούν και τα τρία είδη δυνάμεων:
- **Δυνάμεις διασποράς (London),**
- **Δυνάμεις ξηρής πολικότητας,**
- **Δυνάμεις δεσμών υδρογόνου.**



Σε διάλυμα **ακετόνης** σε ισοπροπανόλη ασκούνται και τα τρία είδη δυνάμεων.

# Πότε ασκούνται συγκεκριμένες δυνάμεις συνοχής;

- Οι δυνάμεις δεσμών υδρογόνου ασκούνται κυρίως όταν στα μόρια υπάρχουν πολικές ομάδες  $-OH$ ,  $-NH-$ ,  $-NH_2$ ,  $COOH$ .
- Οι δυνάμεις ξηρής πολικότητας (Keesom και Debye) ασκούνται μεταξύ ομάδων  $C-O-C$ ,  $C=O$ ,  $C-N=C$ ,  $C-Cl$ , κλπ.
- Οι δυνάμεις διασποράς (London) ασκούνται πρακτικά σε όλες τις περιπτώσεις δεσμών. Ακόμα και στο **νερό**, οι δυνάμεις διασποράς έχουν σημαντική συνεισφορά.

# Διαλυτότητα τριών παραμέτρων: Παράμετροι διαλυτότητας Hansen (HSP)

- Κάθε είδος από τις δυνάμεις που προαναφέρθηκαν συνεισφέρει στις συνολικές δυνάμεις συνοχής.
- Ο Hansen (1966) τις σύνθεσε σε μια ενιαία θεωρία, κατά την οποία η παράμετρος Hildebrand σχηματίζεται με αθροιστικό τρόπο από τρεις επί μέρους παραμέτρους  $\delta_t^2 = \delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2$ .

Όπου :

$\delta_t^2$  = συνολική παράμετρος Hildebrand

$\delta_d^2$  = συνιστώσα διασποράς (δυνάμεις London)

$\delta_p^2$  = συνιστώσα ξηρής πολικότητας (δυνάμεις Keesom και Debye)

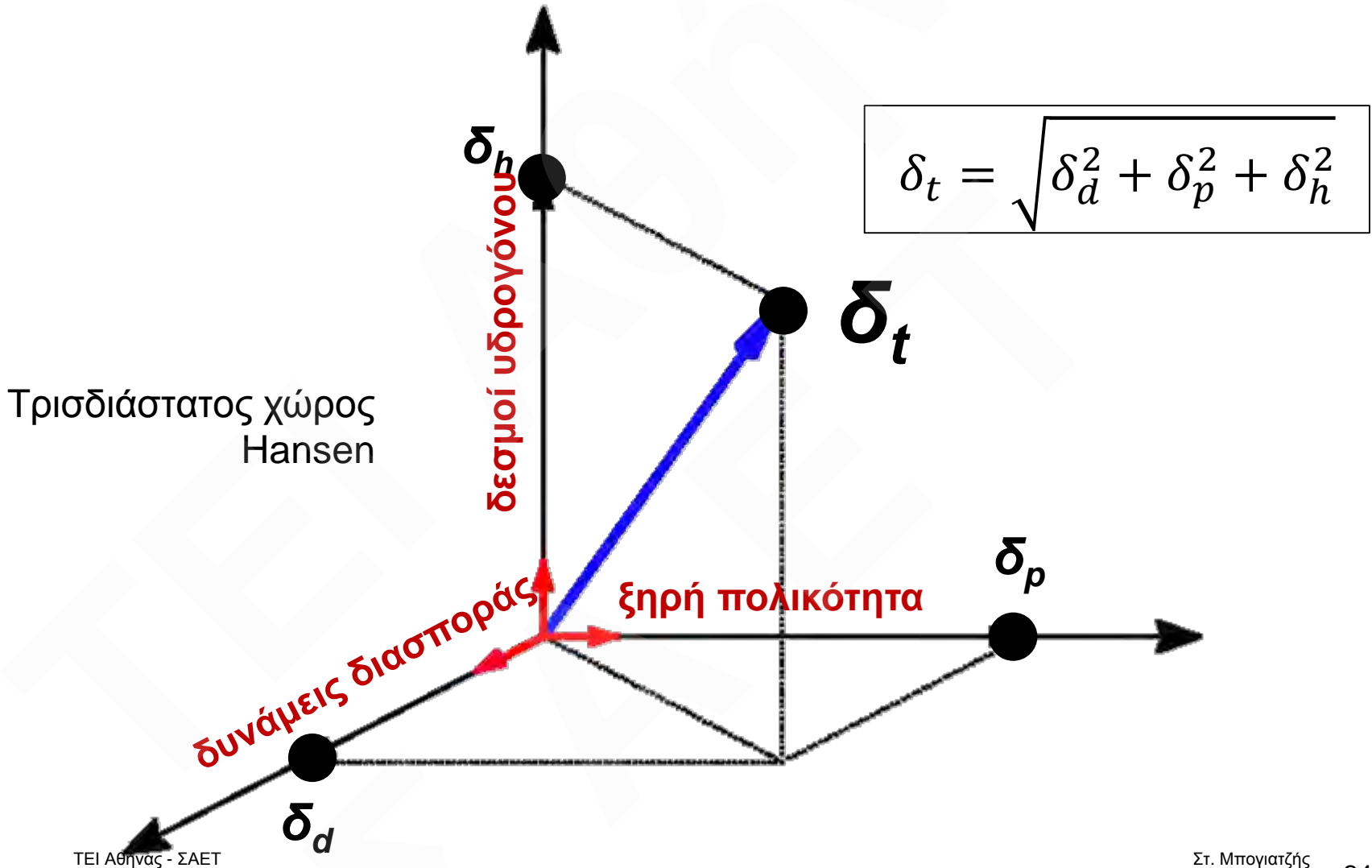
$\delta_h^2$  = συνιστώσα δεσμών υδρογόνου

# Τρισδιάστατο μοντέλο παραμέτρων διαλυτότητας $\delta$ (1 από 2)

- Από τη σχέση τους οι παράμετροι HSP  $\delta_d$ ,  $\delta_p$ ,  $\delta_h$ , καθορίζουν ένα τρισδιάστατο χώρο.
- Σε αυτό το «**χώρο Hansen**» κάθε διαλύτης, κάθε χημική ένωση με μόρια που ασκούν μοριακές (μη ιοντικές δυνάμεις) καταλαμβάνει τη δική της αποκλειστική θέση.



# Τριδιάστατο μοντέλο παραμέτρων διαλυτότητας $\delta$ (2 από 2)







# Πώς προσδιορίζονται οι παράμετροι διαλυτότητας Hansen;

Κάθε μια από τις παραμέτρους Hansen μπορεί να μετρηθεί με την “ομοιομορφική” μέθοδο:

- Π.χ. για τη βουτανόλη, η τιμή της παραμέτρου Hildebrand είναι  $\delta_t=23.1$
- Μη πολικό «ομοιομορφικό» μόριο προς τη βουτανόλη είναι το **βουτάνιο**, οπότε η τιμή  $\delta_t=14.5$  του βουτανίου αποτελεί τη βάση για την τιμή της παραμέτρου διασποράς  $\delta_d$  για τη βουτανόλη.
- Από τη σχέση  $[\delta_t^2 - \delta_d^2]^{1/2}$  προκύπτει η **συνολική πολική συνιστώσα**  $\delta_a$ .
- Με δοκιμές χρησιμοποιώντας διάφορα μόρια, ο Hansen διαχώρισε την  $\delta_a$  σε  $\delta_p$  και  $\delta_h$ .

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (1 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
n-βουτάνιο	14.1	14.1	0.0	0.0
n-πεντάνιο	14.5	14.5	0.0	0.0
 n-εξάνιο	14.9	14.9	0.0	0.0
n-επτάνιο	15.3	15.3	0.0	0.0
n-οκτάνιο	15.5	15.5	0.0	0.0
ισοοκτάνιο	14.3	14.3	0.0	0.0
n-δωδεκάνιο	16.0	16.0	0.0	0.0
 κυκλοεξάνιο	16.8	16.8	0.0	0.2
μεθυλο-κυκλοεξάνιο	16.0	16.0	0.0	0.0
βενζόλιο	18.6	18.4	0.0	2.0
 τολουόλιο	18.2	18.0	1.4	2.0
ναφθαλίνιο	20.3	19.2	2.0	5.9
στυρόλιο	19.0	18.6	1.0	4.1
 ο-ξυλένιο	18.0	17.8	1.0	3.1
αιθυλβενζόλιο	17.8	17.8	0.6	1.4
p-διαιθυλ-βενζόλιο	18.0	18.0	0.0	0.6

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (2 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
χλωρομεθάνιο	17.0	15.3	6.1	3.9
διχλωρομεθάνιο	20.3	18.2	6.3	6.1
1,1 διχλωροαιθυλένιο	18.8	17.0	6.8	4.5
χλωροφόρμιο	19.0	17.8	3.1	5.7
1,1 διχλωροαιθάνιο	18.5	16.6	8.2	0.4
τριχλωροαιθυλένιο	19.0	18.0	3.1	5.3
τετραχλωράνθρακας	17.8	17.8	0.0	0.6
χλωροβενζόλιο	19.6	19.0	4.3	2.0
ο-διχλωροχλωροβενζόλιο	20.5	19.2	6.3	3.3
τετραυδροφουράνιο (THF)	19.4	16.8	5.7	8.0
1,4 διοξάνιο	20.5	19.0	1.8	7.4
δαιθυλαιθέρας	15.8	14.5	2.9	5.1
διβενζυλαιθέρας	19.3	17.4	3.7	7.4

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (3 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
ακετόνη	20.0	15.5	10.4	7.0
μεθυλαιθυλοκετόνη (ΜΕΚ)	19.0	16.0	9.0	5.1
κυκλοεξανόνη	19.6	17.8	6.3	5.1
διαιθυλοκετόνη	18.1	15.8	7.6	4.7
ακετοφαινόνη	21.8	19.6	8.6	3.7
μεθυλο-ισοβουτυλοκετόνη	17.0	15.3	6.1	4.1
μεθυλο-ισοαμυλοκετόνη	17.4	16.0	5.7	4.1
ισοφορόνη	19.9	16.6	8.2	7.4
δι-ισοβουτυλοκετόνη	16.9	16.0	3.7	4.1
καρβονικός εστέρας αιθυλενογλυκόλης	29.6	19.4	21.7	5.1
οξικός μεθυλεστέρας	18.7	15.5	7.2	7.6
μυρμηκικός αιθυλεστέρας	18.7	15.5	7.2	7.6
καρβονικός εστέρας της προπυλένογλυκόλης-1,2	27.3	20.0	18.0	4.1
οξικός αιθυλεστέρας	18.1	15.8	5.3	7.2
καρβονικός διαιθυλεστέρας	17.9	16.6	3.1	6.1
θειικός διαιθυλεστέρας	22.8	15.8	14.7	7.2

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (4 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
οξικός n-βουτυλεστέρας	17.4	15.8	3.7	6.3
οξικός ισοβουτυλεστέρας	16.8	15.1	3.7	6.3
οξικός 2-αιθοξυαιθυλεστέρας	20.0	16.0	4.7	10.6
οξικός ισοαμυλεστέρας	17.1	15.3	3.1	7.0
ισοβουτυρικός ισοβουτυλεστέρας	16.5	15.1	2.9	5.9
νιτρομεθάνιο	25.1	15.8	18.8	5.1
νιτροαιθάνιο	22.7	16.0	15.5	4.5
2-νιτροπροπάνιο	20.6	16.2	12.1	4.1
νιτροβενζόλιο	22.2	20.0	8.6	4.1
αιθανολαμίνη	31.5	17.2	15.6	21.3
αιθυλενοδιαμίνη	25.3	16.6	8.8	17.0
πυριδίνη	21.8	19.0	8.8	5.9
μορφολίνη	21.5	18.8	4.9	9.2
ανιλίνη	22.6	19.4	5.1	10.0
N-μεθυλ-πυρολιδόνη	22.9	18.0	12.3	7.2
κυκλοεξυλαμίνη	18.9	17.4	3.1	6.6
κινολίνη	22.0	19.4	7.0	7.6

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (5 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
φορμαμίδιο	36.6	17.2	26.2	19.0
<b>N,N-διμεθυλοφορμαμίδιο (DMF)</b>	24.8	17.4	13.7	11.3
διθειάνθρακας	20.5	20.5	0.0	0.6
διμεθυλοσουλφοξείδιο (DMSO)	26.7	18.4	16.4	10.2
αιθανοθειόλη	18.6	15.8	6.6	7.2
μεθανόλη	29.6	15.1	12.3	22.3
αιθανόλη	26.5	15.8	8.8	19.4
αλλυλική αλκοόλη	25.7	16.2	10.8	16.8
1-προπανόλη	24.5	16.0	6.8	17.4
2-προπανόλη	23.5	15.8	6.1	16.4
1-βουτανόλη	23.1	16.0	5.7	15.8
2-βουτανόλη	22.2	15.8	5.7	14.5
ισοβουτανόλη	22.7	15.1	5.7	16.0
βενζυλική αλκοόλη	23.8	18.4	6.3	13.7

# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (6 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
κυκλοεξανόλη	22.4	17.4	4.1	13.5
διακετονοαλκοόλη	20.8	15.8	8.2	10.8
μονοαιθυλαιθέρας της αιθυλενογλυκόλης	23.5	16.2	9.2	14.3
μονοαιθυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	22.0	16.2	7.8	12.7
μονομεθυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	22.3	16.2	9.2	12.3
μονοβουτυλαιθέρας της αιθυλενογλυκόλης	20.8	16.0	5.1	12.3
μονοβουτυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	20.4	16.0	7.0	10.6
1 -δεκανόλη	20.4	17.6	2.7	10.0
μυρμηκικό οξύ	24.9	14.3	11.9	16.6
οξικό οξύ	21.4	14.5	8.0	13.5
βενζοϊκό οξύ	21.8	18.2	7.0	9.8
ελαϊκό οξύ	15.6	14.3	3.1	14.3
στεατικό οξύ	17.6	16.4	3.3	5.5



# Πίνακας: παράμετροι Hansen για διαλύτες στους 25°C (7 από 8)

solvent	$\delta_h$	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_t$
φαινόλη	24.1	18.0	5.9	14.9
ρεσορκινόλη	29.0	18.0	8.4	21.1
m-κρεσόλη	22.7	18.0	5.1	12.9
σαλικυλικός μεθυλεστέρας	21.7	16.0	8.0	12.3
αιθυλενογλυκόλη	32.9	17.0	11.0	26.0
γλυκερόλη	36.1	17.4	12.1	29.3
προπυλενογλυκόλη	30.2	16.8	9.4	23.3
διαιθυλενογλυκόλη	29.9	16.2	14.7	20.5
τριαιθυλενογλυκόλη	27.5	16.0	12.5	18.6
διπροπυλενογλυκόλη	31.7	16.0	20.3	18.4
νερό	47.8	15.6	16.0	42.3

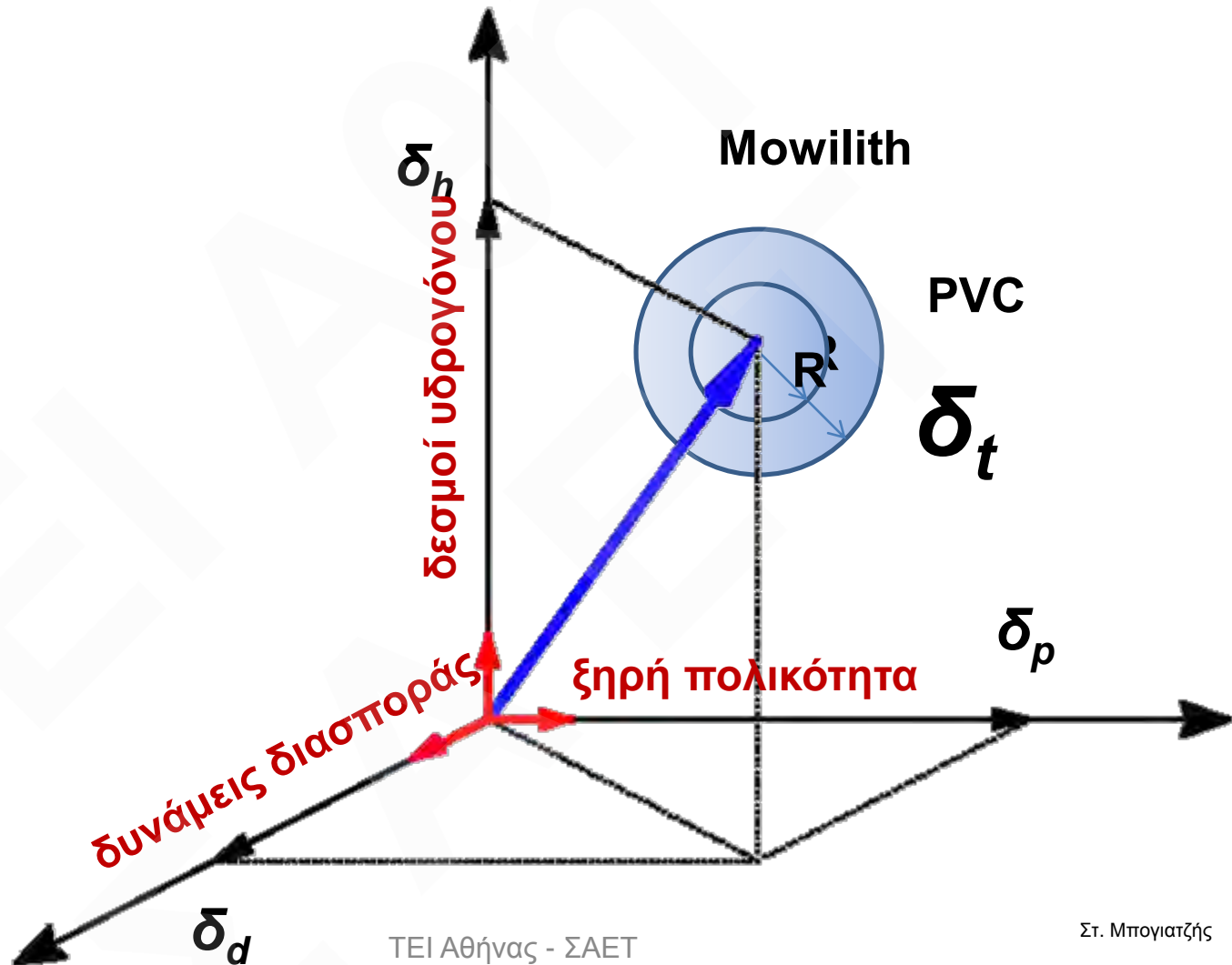
# Παράμετροι διαλυτότητας Hansen για ρητίνες, πολυμερή, κλπ.

Πολυμερές	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_h$	R
Οξική κυτταρίνη	18.6	12.7	11.0	7.6
Ελαστομερές ισοπρενίου (Ceriflex <sup>®</sup> IR305, Shell)	16.6	1.4	-0.8	9.6
Νιτρική κυτταρίνη	15.4	14.7	8.8	11.5
Πολυαμίδιο (Versamid <sup>®</sup> 930, General Mills)	17.4	-1.9	14.9	9.6
Πολύ-ισοβουτένιο (Lutonal <sup>®</sup> IC-123, BASF)	14.5	2.5	4.7	12.7
Πολυμεθακρυλικός αιθυλεστέρας (PEMA)	17.6	9.7	4.0	10.6
Πολυμεθακρυλικός μεθυλεστέρας (PMMA)	18.6	10.5	7.5	8.6
Πολυστυρένιο (Polystyrene LO, BASF)	21.3	5.8	4.3	12.7
Οξικός πολυβινυλεστέρας (Mowilith)	20.9	11.3	9.6	13.7
Πολυβινυλική βουτυράλη	18.6	4.4	13.0	10.6
Πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC)	18.2	7.5	8.3	3.5

# Σφαίρα αντί για σημείο διαλυτότητας Hansen (1 από 2)

Πολυμερές	$\delta_d$	$\delta_p$	$\delta_h$	R
Οξικός πολυβινυλεστέρας (Mowilith)	20.9	11.3	9.6	13.7
Πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC)	18.2	7.5	8.3	3.5

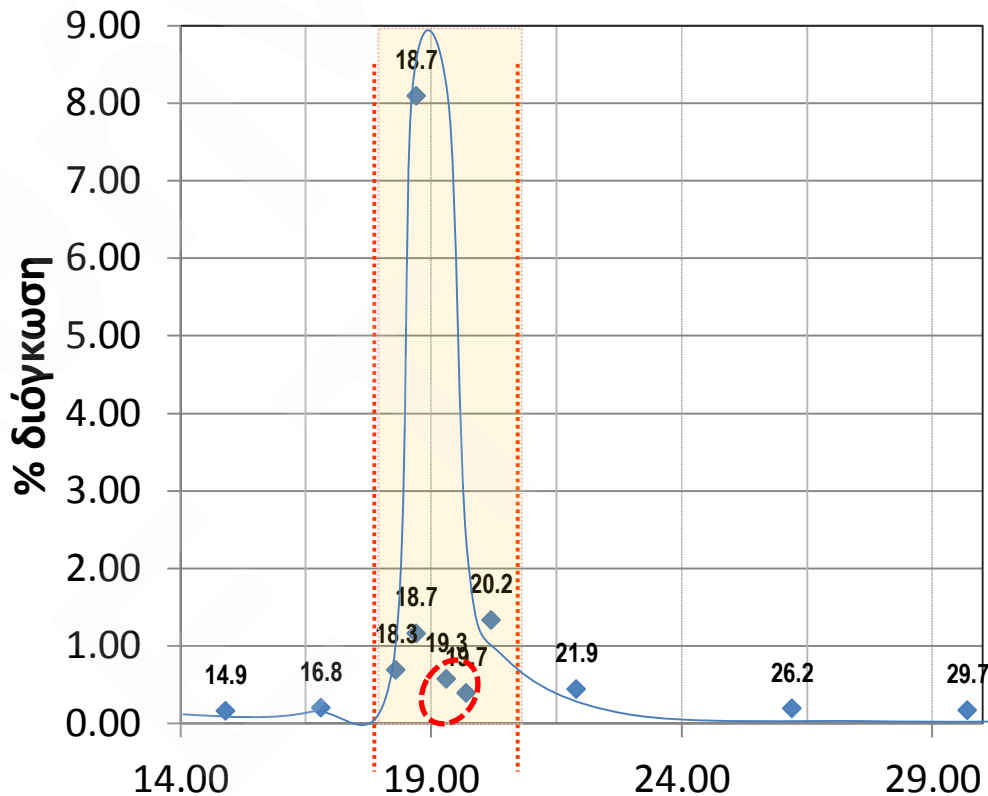
# Σφαίρα αντί για σημείο διαλυτότητας Hansen



# Επιστροφή στην αφαίρεση στρώματος φυσικού πολυμερούς με διαλύτες

- Γιατί, το στρώμα **λινελαίου** αφαιρείται από τους χλωριωμένους διαλύτες, ενώ όχι από την **ακετόνη** και την **ΜΕΚ**;
- Αν και οι παράμετροι Hildebrand είναι παρόμοιες για τους διαλύτες αυτούς, οι χλωριωμένοι διαλύτες έχουν παρόμοιες τιμές  $\delta_d$  με το **λινέλαιο**.

ΤΕΙ Αθήνας - ΣΑΕΤ



παράμετρος διαλυτότητας Hildebrand,  $\delta$  (SI)

(Burke, J., Solubility Parameters and Application, The Book and Paper Group, J. American Inst. for Conserv., v. 3, 1984. Τ. Μπιογιατζής

# Ποιες παραμέτρους χρησιμοποιούμε;

- Δεν χρησιμοποιούμε τις παραμέτρους διαλυτότητας Hildebrand!
- Αντί για αυτές χρησιμοποιούμε το τριμερές σύστημα των

$$\delta_d, \delta_p, \text{ και } \delta_h .$$

- Η χρήση των τρισδιάστατων χώρων έχει πολλές δυσκολίες.
- Πιο πρακτική είναι η χρήση **κλασματικών παραμέτρων** διαλυτότητας (ή παραμέτρων Teas).

$$f_d = \frac{\delta_d}{\delta_d + \delta_p + \delta_h}$$

# Κλασματικές παράμετροι διαλυτότητας (παράμετροι Teas)

- Οι τρεις κλασματικές παράμετροι διαλυτότητας που σχηματίζονται με τον παραπάνω τρόπο είναι :

$$f_d = \frac{\delta_d}{\delta_d + \delta_p + \delta_h}$$

$$f_p = \frac{\delta_p}{\delta_d + \delta_p + \delta_h}$$

$$f_h = \frac{\delta_h}{\delta_d + \delta_p + \delta_h}$$

$$f_d + f_p + f_h = 1$$

Στην πράξη χρησιμοποιούνται οι παράμετροι  **$100f_d$** ,  **$100f_p$** , και  **$100f_h$** .

# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (1 από 8)

solvent	fd	fp	fh
n-βουτάνιο	100,00	0,00	0,00
n-πεντάνιο	100,00	0,00	0,00
n-εξάνιο	100,00	0,00	0,00
n-επτάνιο	100,00	0,00	0,00
n-οκτάνιο	100,00	0,00	0,00
ισοοκτάνιο	100,00	0,00	0,00
n-δωδεκάνιο	100,00	0,00	0,00
κυκλοεξάνιο	98,82	0,00	1,18
μεθυλκυκλοεξάνιο	100,00	0,00	0,00
βενζόλιο	90,29	0,00	9,71
τολουόλιο	84,26	6,48	9,26
ναφθαλίνιο	71,99	7,09	20,92
στυρόλιο	78,84	4,15	17,01
ο-ξυλόλιο (ή ξυλένιο)	81,45	4,52	14,03
αιθυλβενζόλιο	89,90	3,03	7,07
p- δισυλοβενζόλιο	96,77	0,00	3,23



# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (2 από 8)

solvent	fd	fp	fh
χλωρομεθάνιο	62,96	22,59	14,44
μεθυλενοχλωρίδιο	62,08	19,27	18,65
1,1 διχλωροαιθυλένιο	62,46	22,59	14,95
1,2 διχλωροαιθάνιο (αιθυλενοδιχλωρίδιο)	64,51	22,84	12,65
χλωροφόρμιο	68,35	11,15	20,50
1,1 διχλωροαιθάνιο	68,27	30,26	1,48
τριχλωροαιθυλένιο	69,34	11,31	19,34
τετραχλωράνθρακας	96,74	0,00	3,26
χλωροβενζόλιο	75,68	16,60	7,72
ο-διχλωροβενζόλιο	68,11	20,93	10,96
1,1,2 τριχλωρο-1,2,2-τριφθοροαιθάνιο	90,18	9,82	0,00
τετραϋδροφουράνιο (THF)	58,61	17,22	24,17
1,4 διοξάνιο	69,02	6,06	24,92
διαιθυλαιθέρας	66,39	12,18	21,43
διβενζυλαιθέρας	63,49	12,17	24,34

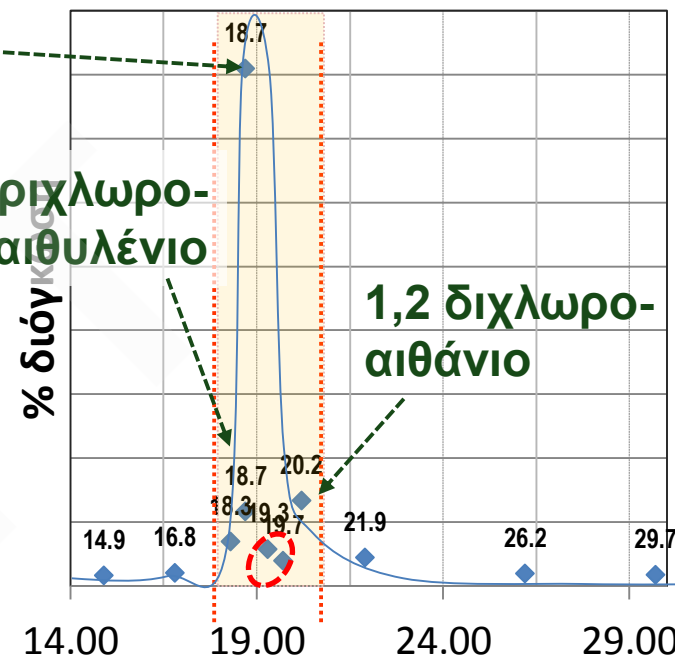
# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (3 από 8)

Διαλύτης	100f <sub>h</sub>	100f <sub>d</sub>	100f <sub>p</sub>
τριχλωροαιθυλένιο	69,3	11,3	19,3
χλωροφόρμιο	68,3	11,1	20,5
1,2 διχλωροαιθάνιο	64,5	22,8	12,6
μεθυλοαιθυλοκετόνη	53,4	27,8	18,7
ακετόνη	53,5	27,8	18,7

χλωροφόρμιο

Τριχλωρο-  
αιθυλένιο

1,2 διχλωρο-  
αιθάνιο



παράμετρος διαλυτότητας Hildebrand,  $\delta$  (SI)

# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (4 από 8)

solvent	fd	fp	fh
ακετόνη	63,49	12,17	24,34
Μεθυλο-αιθυλοκετόνη (ΜΕΚ)	53,48	27,81	18,72
κυκλοεξανόνη	57,40	27,19	15,41
διαιθυλοκετόνη	63,23	20,32	16,45
ακετοφαινόνη	59,54	25,00	15,46
μεθυλο-ισοβουτυλοκετόνη	63,93	25,22	10,85
μεθυλο-ισοαμυλοκετόνη	62,50	22,43	15,07
ισοφορόνη	63,97	20,96	15,07
δι-ισοβουτυλοκετόνη	56,06	23,10	20,85
ανθρακικός αιθυλεστέρας	68,42	14,98	16,60
οξικός μεθυλεστέρας	52,48	38,48	9,04
μυρμηκικός αιθυλεστέρας	55,82	21,49	22,69
ανθρακικός προπυλενεστέρας-1,2	55,82	21,49	22,69
οξικός αιθυλεστέρας	55,26	36,44	8,30
ανθρακικός διαιθυλεστέρας	59,15	17,32	23,53
οξικός διαιθυλεστέρας	66,05	11,44	22,51

# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (5 από 8)

solvent	fd	fp	fh
οξικός η-βουτυλεστέρας	63,50	13,50	22,99
οξικός ισοβουτυλεστέρας	62,69	13,81	23,51
οξικός 2-αιθοξυ-αιθυλεστέρας	56,66	13,31	30,03
οξικός ισοαμυλεστέρας	62,87	11,40	25,74
Ισοβουτυρικός ισοβουτυλεστέρας	65,22	11,46	23,32
νιτρομεθάνιο	51,22	38,37	10,41
νιτροαιθάνιο	53,16	36,30	10,54
2-νιτροπροπάνιο	55,98	32,88	11,14
νιτροβενζόλιο	63,61	24,64	11,75
αιθανολαμίνη	46,05	22,81	31,14
αιθυλενοδιαμίνη	49,51	17,22	33,27
πυριδίνη	59,73	24,11	16,16
μορφολίνη	60,39	13,76	25,84
ανιλίνη	59,95	13,53	26,53
N-μεθυλ-πυρολιδόνη	54,01	29,01	16,98
κυκλοεξυλαμίνη	66,08	10,84	23,08
κινολίνη	60,11	19,13	20,77

# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (6 από 8)

solvent	fd	fp	fh
φορμαμίδιο	44,74	32,03	23,23
N,N-διμεθυλοφορμαμίδιο (DMF)	49,80	27,51	22,69
διθειάνθρακας	97,16	0,00	2,84
διμεθυλοσουλφοξείδιο (DMSO)	50,09	30,77	19,14
αιθανοθειόλη	57,41	20,37	22,22
μεθανόλη	46,11	19,16	34,74
αιθανόλη	48,45	16,09	35,47
αλλυλική αλκοόλη	48,22	20,26	31,52
1-προπανόλη	50,31	13,96	35,73
2-προπανόλη	51,09	13,26	35,65
1-βουτανόλη	51,79	12,78	35,43
2-βουτανόλη	52,36	13,44	34,20
ισοβουτανόλη	51,13	12,84	36,04
βενζυλική αλκοόλη	54,34	14,38	31,28

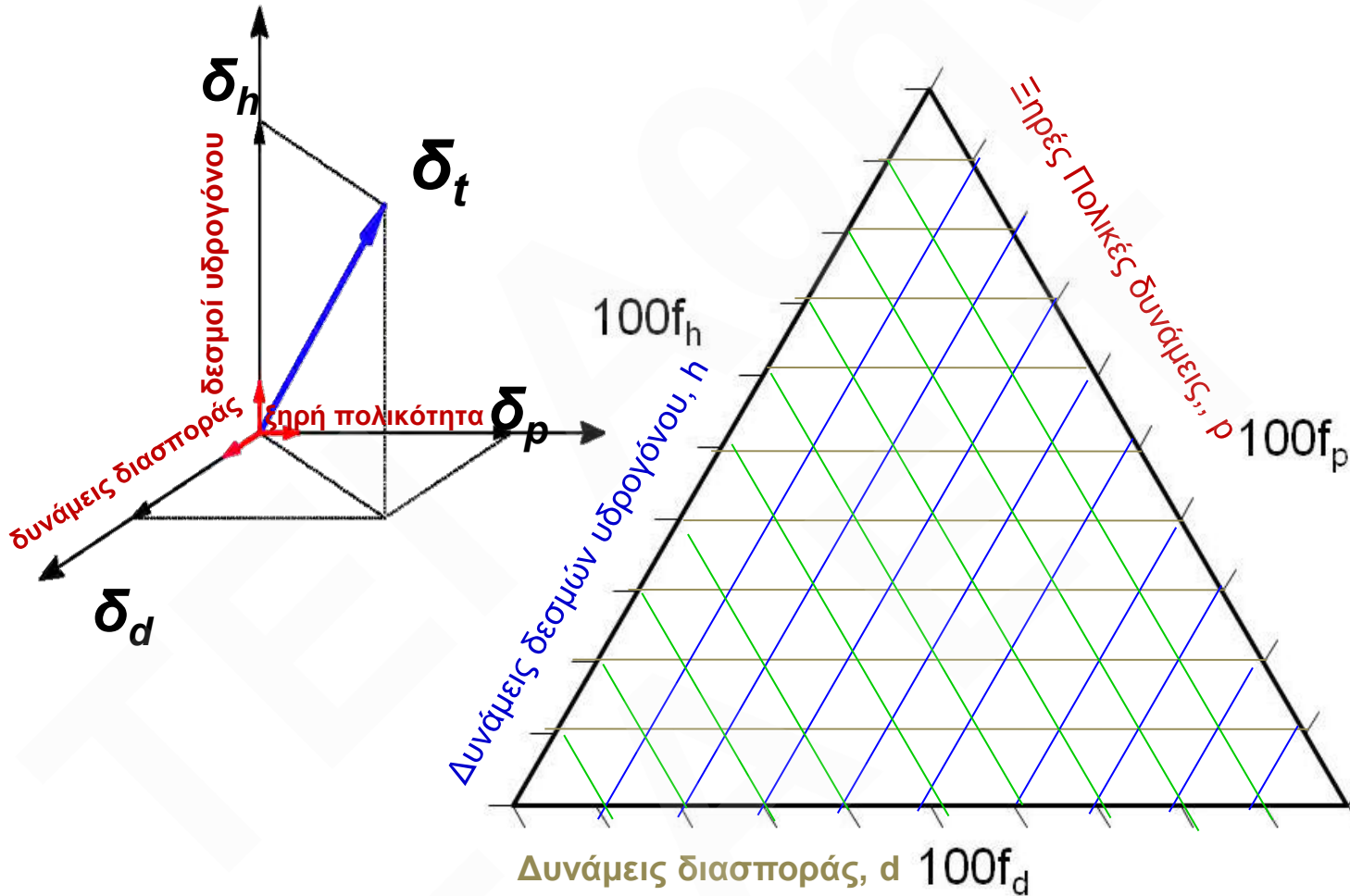
# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (7 από 8)

solvent	fd	fp	fh
κυκλοεξανόλη	56,00	10,25	33,75
διακετονοαλκοόλη	52,26	20,60	27,14
μονοαιθυλαιθέρας της αιθυλενογλυκόλης	50,00	19,57	30,43
μονοαιθυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	51,76	18,35	29,88
μονομεθυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	50,91	21,00	28,08
μονοβουτυλαιθέρας της αιθυλενογλυκόλης	54,45	13,35	32,20
μονοβουτυλαιθέρας της διαιθυλενογλυκόλης	53,68	18,42	27,89
1 -δεκανόλη	61,63	8,16	30,21
μυρμηκικό οξύ	46,63	22,28	31,09
οξικό οξύ	49,88	18,65	31,47
βενζοϊκό οξύ	56,48	18,13	25,39
ελαϊκό οξύ	47,27	9,39	43,33
στεατικό οξύ	66,67	12,50	20,83

# Πίνακας: παράμετροι Teas για διαλύτες στους 25°C (8 από 8)

solvent	fd	fp	fh
φαινόλη	53,67	13,14	33,18
ρεσορκινόλη	49,57	14,36	36,07
m-κρεσόλη	55,77	12,53	31,70
σαλικυλικός μεθυλεστέρας	51,67	19,05	29,29
αιθυλενογλυκόλη	47,07	15,74	37,20
γλυκερόλη	46,58	15,61	37,81
προπυλενογλυκόλη	48,01	14,94	37,04
διαιθυλενογλυκόλη	45,93	22,58	31,49
τριαιθυλενογλυκόλη	46,93	21,33	31,74
διπροπυλενογλυκόλη	45,03	28,84	26,14
νερό	45,05	15,08	39,87

# Το τριγωνικό διάγραμμα διαλυτότητας (ή διάγραμμα Teas)



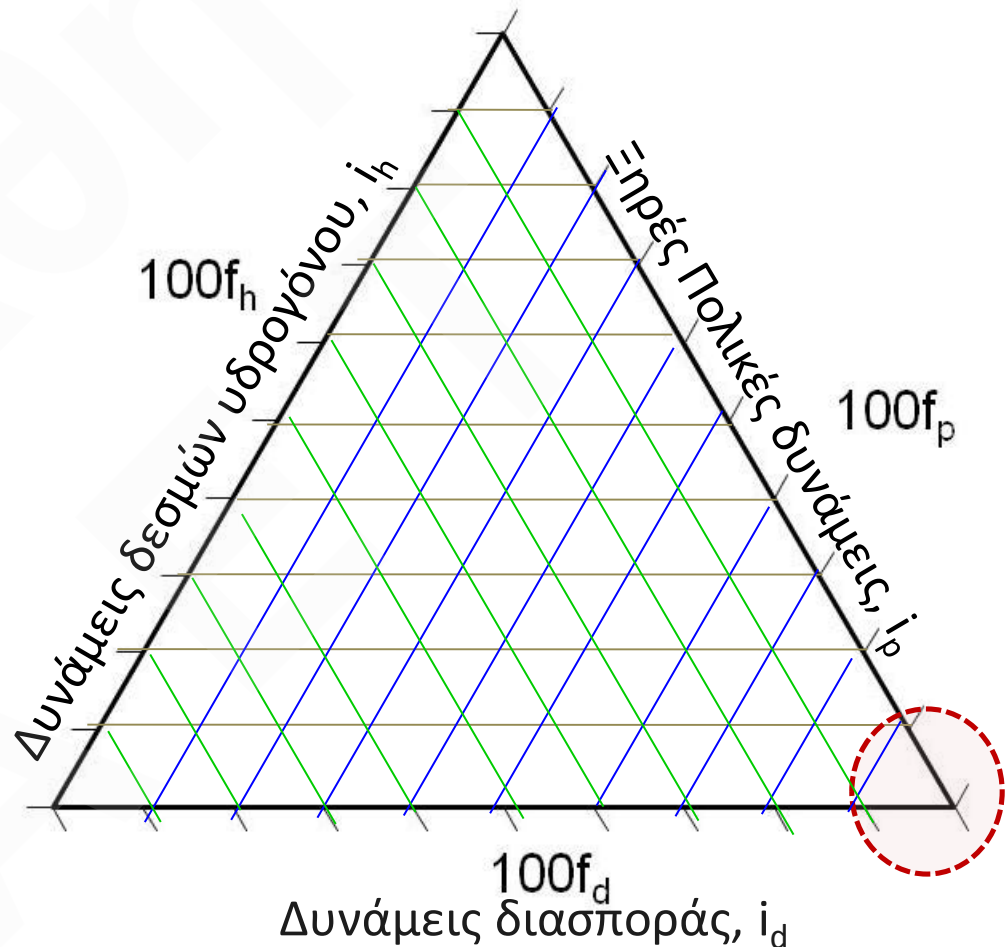


# Το τρίγωνο διαλυτότητας

Τα αλκάνια (κορεσμένοι υδρογ/κες) έχουν διαμοριακές δυνάμεις αποκλειστικά λόγω των δυνάμεων διασποράς:

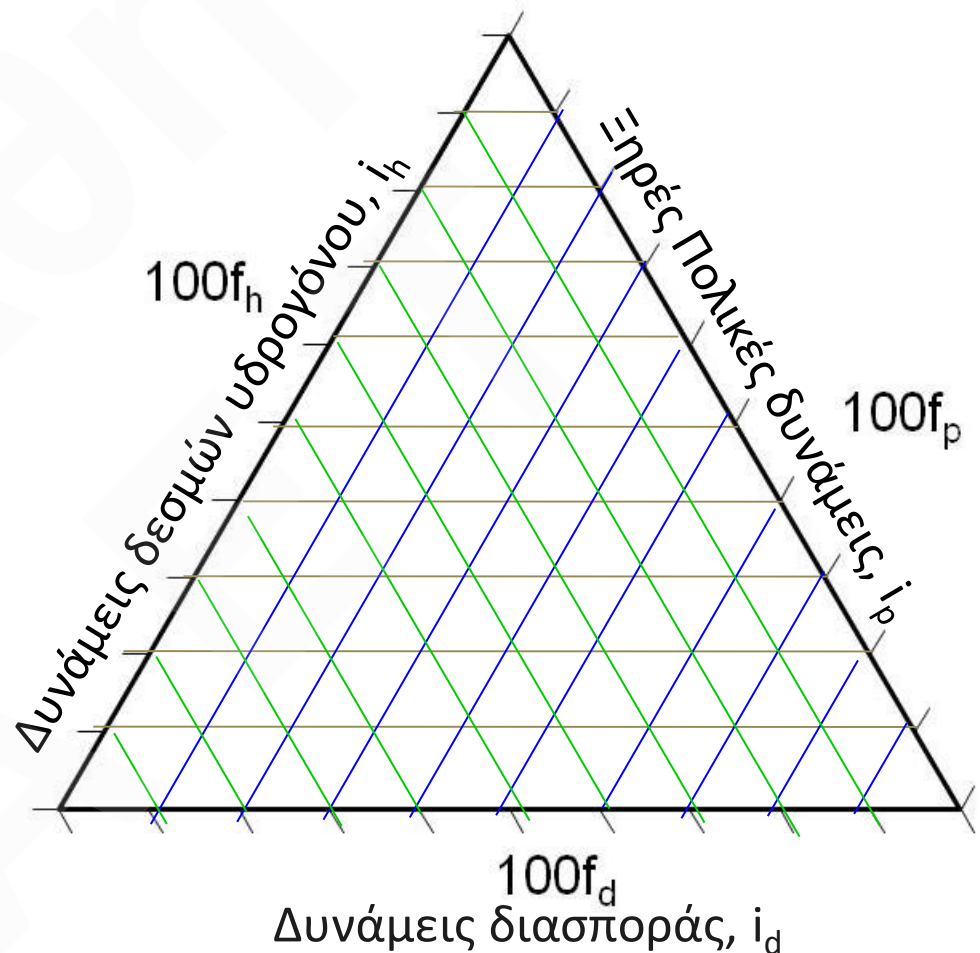
$$f_p = 0 \text{ και } f_h = 0$$

Συνεπώς στο τριγωνικό διάγραμμα θα βρεθούν στην κάτω δεξιά γωνία.



# Το τριγωνικό διάγραμμα διαλυτότητας

Πιο πολικά μόρια έχουν την παράμετρο των δυνάμεων διασποράς κάτω του 100, ενώ οι πολικές δυνάμεις μοιράζονται μεταξύ ξηρής πολικότητας και δεσμών υδρογόνου.

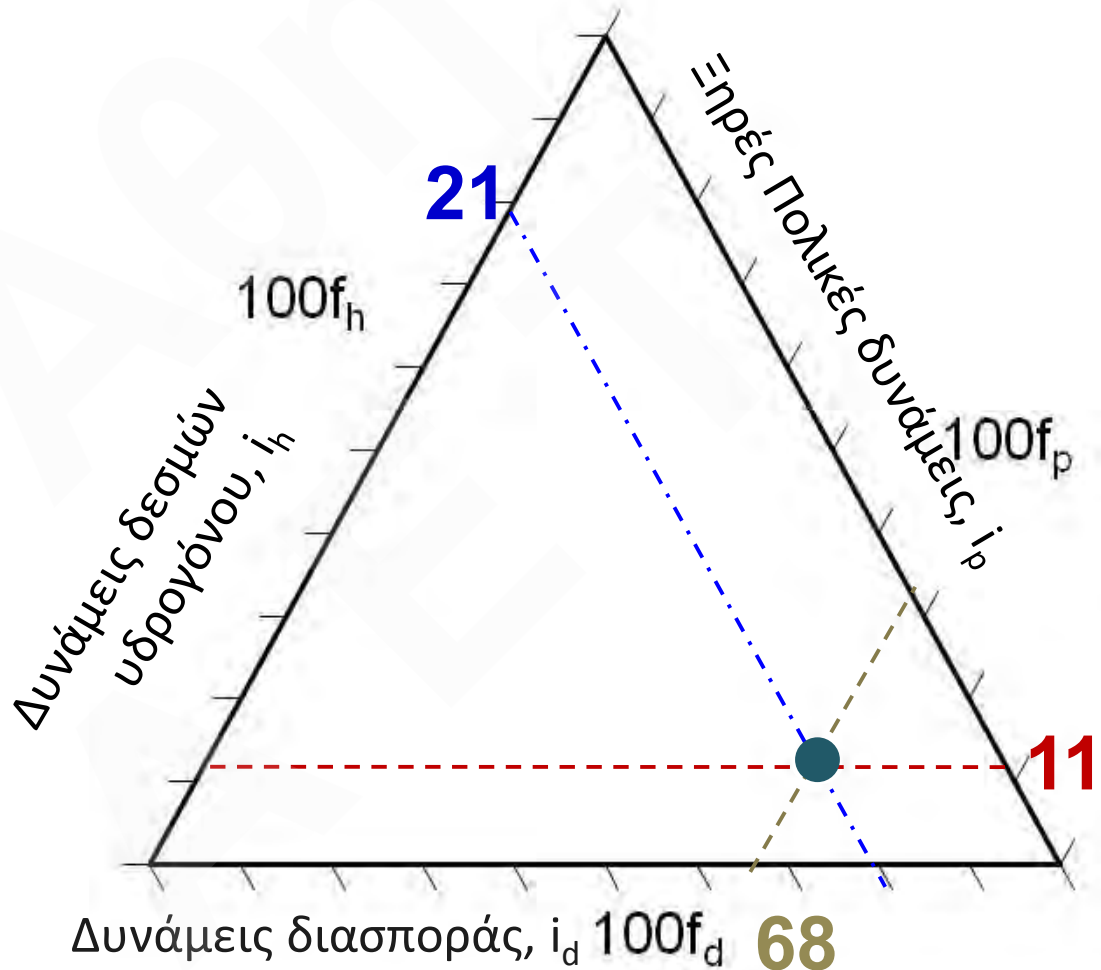


# Η εύρεση της θέσης στο τριγωνικό διάγραμμα

Παράδειγμα:

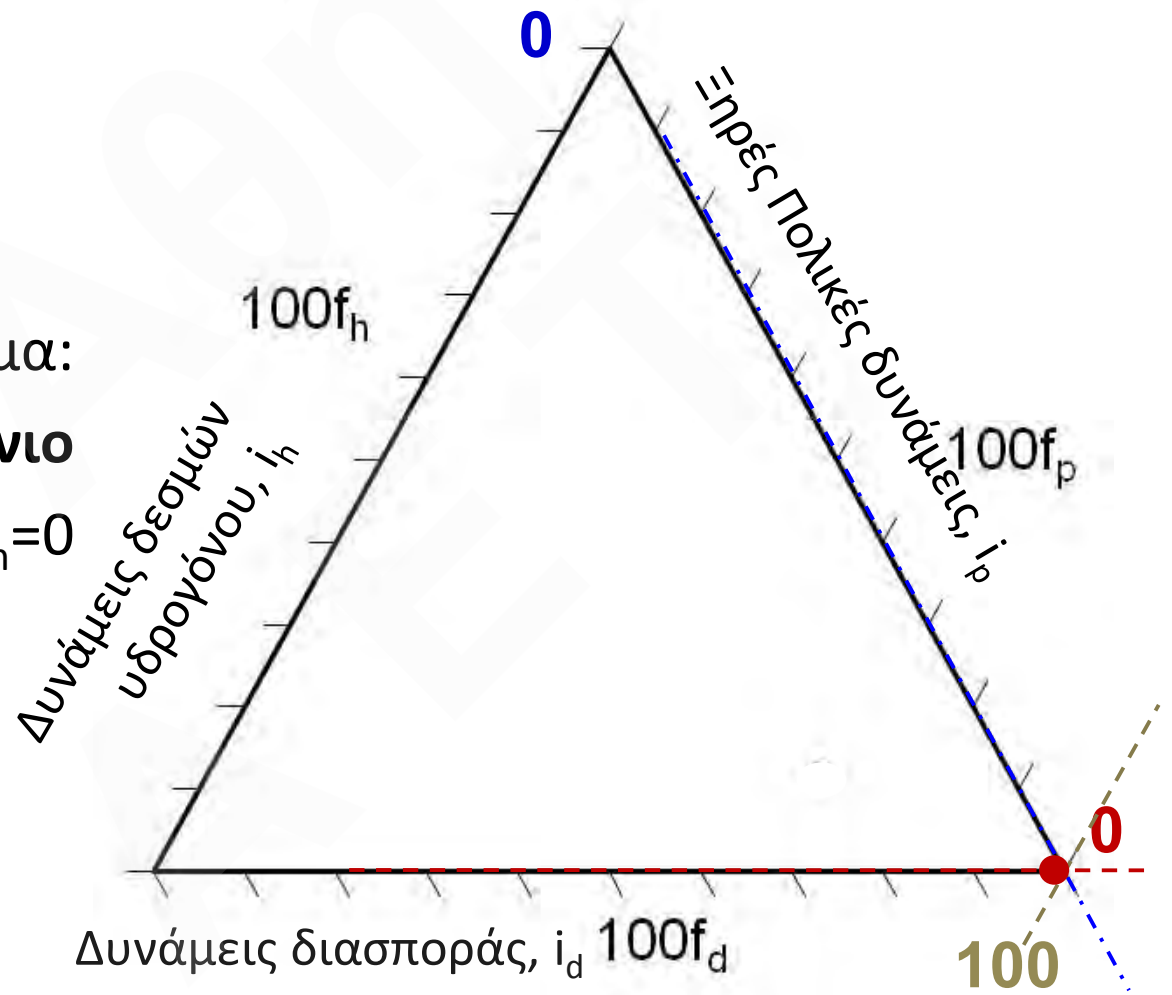
**Χλωροφόρμιο**

$f_d=68, f_p=11, f_h=21$



# Η θέση ενός διαλύτη στο τριγωνικό διάγραμμα

Παράδειγμα:  
**Εξάνιο**  
 $f_d=100, f_p=0, f_h=0$



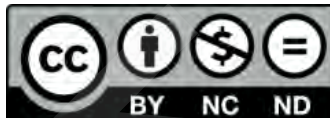
# Βιβλιογραφία (1 από 2)

- Hansen, C. M., The Three Dimensional Solubility Parameter and Solvent Diffusion Coefficient, PhD Thesis, Danish Technical Press, Copenhagen, 1967
- Burke, J., Solubility Parameters and Application, *The Book and Paper Group, J. American Inst. for Conserv.*, v. 3, 1984; The Book and Paper Group ANNUAL, Volume three, 1984
- Horie, V., Materials for Conservation, Elsevier & Butterworth-Heinemann, 2<sup>nd</sup> Ed., Amsterdam 2010
- Durkee, J. B., Cleaning with Solvents. Science and Technology, Elsevier & William Andrew, Amsterdam 2014

# Βιβλιογραφία (2 από 2)

- Wypych G., Handbook of Solvents, ChemTec Publishing, Toronto-New York, 2000
- Moncrieff, A. and; Weaver, G; Science for Conservators Book 2: Cleaning. Conservation Unit/Routledge 1987
- Torraca, G; Solubility and solvents for conservation problems. ICCROM, Rome 1978

# Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

