

.....

Nominated CI:	Lubomir Hnedkovsky
Type of Application:	
Project Title:	Thermodynamics of mixed aqueous electrolytes at high temperatures

ASSESSMENT

Investigator(s) (40%)

Please comment on:

- Research opportunity and performance evidence (ROPE)
- Capacity to undertake the proposed research

The research team consists of a post doctorate fellow performing most of experimental tasks (densitometry and heat capacity measurements over a wide range of conditions), under the guidance of the chief investigator (L. Hnedkovsky) and the partner investigator (G. Hefter). The latter two investigators, both staffers of the Murdoch University, are responsible for the scientific outcome of the project.

Lubomir Hnedkovsky is a well-known experimentalist specialized in thermodynamics of aqueous solutions over a wide range of temperatures and pressures up to the critical region water. He has been involved over the past 25 years in experimental determination of densities and heat capacities of aqueous systems using on purpose instrumentation that he has often designed and/or constructed himself (University of Delaware, USA; Blaise Pascal University, Clermont-Ferrand, France; Prague Institute of Chemical Technology, Czech Republic; Murdoch University, Perth, Australia).

Glenn Hefter has been publishing extensively in the field of experimental solution chemistry over 40 years, treating wide range of systems consisting of both electrolyte and nonelectrolyte solutes and aqueous and nonaqueous solvents. He is proficient in experimental techniques and theories for determination and interpretation of thermodynamic, electrochemical and transport properties of solutions at near ambient and elevated conditions. He has been involved over many years in activities of learnt societies, namely of IUPAC, and is a long-time member of the editorial board of the Journal of Solution Chemistry.

The complementary expertise of the chief and partner investigators make them an ideal tandem for carrying out the submitted project.

Výzkumný tým se skládá z postdoktorandů provádějících většinu experimentálních úkolů (denzitometrie a měření tepelné kapacity v širokém rozsahu podmínek) pod vedením hlavního výzkumného pracovníka (L. Hnedkovského) a partnerského výzkumného pracovníka (G. Hefter). Poslední dva vyšetřovatelé, oba pracovníci Murdochovy univerzity, jsou zodpovědní za vědecké výsledky projektu. Lubomír Hnedkovský je známý experimentátor specializující

se na termodynamiku vodných roztoků v širokém rozmezí teplot a tlaků až do vody kritické oblasti. **Během posledních 25 let se podílel na experimentálním** stanovení hustot a tepelných kapacit vodných systémů pomocí účelové instrumentace, kterou často sám navrhoval a / nebo konstruoval (University of Delaware, USA; Blaise Pascal University, Clermont-Ferrand, Francie ; Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Česká republika; Murdochova univerzita, Perth, Austrálie).

Glenn Hefter již více než 40 let vydává rozsáhlé publikace v oblasti chemie experimentálních roztoků, které se zabývají širokou škálou systémů skládajících se jak z elektrolytových, tak z neelektrolytových solutů a vodných a nevodná rozpouštědla. Je odborníkem v experimentálních technikách a teoriích pro stanovení a interpretaci termodynamických, elektrochemických a transportních vlastností roztoků v podmínkách blízkých okolí a za zvýšených podmínek. Dlouhodobě se podílí na aktivitách naučených společností, zejména IUPAC, a je dlouholetým členem redakční rady Journal of Solution Chemistry. Díky doplňkovým odborným znalostem hlavních a partnerských vyšetřovatelů je ideálním tandemem **pro realizace** předloženého projektu.

Toto bylo jen okecávání „co dělá a dělal“ ale kde jsou konkrétní výsledky ?..a jak byly uplatněny v praxi ??? kde např. ??

JN 05.03.2021

Hustoty vodných roztoků síranu lithného (Li_2SO_4) při koncentraci solutů v rozmezí od 0,05 do $2,7 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1}$ byly měřeny hustotou vibračních trubic v teplotním rozsahu $373,15 \leq T / \text{K} \leq 573,15$ při tlacích blízkých tlaku nasycených par. čisté vody. Zdánlivé molární objemy (V_ϕ) Li_2SO_4 (aq) vypočtené z těchto dat spolu s dříve publikovanými daty na 323,15 a 343,15 K byly vyneseny pomocí modifikované Redlich-Rosenfeld-Meyerovy rovnice, která byla následně použita k extrapolaci experimentálních dat do nekonečna ředění pro získání standardních parciálních molárních objemů. Srovnání současných a literárních údajů odhalilo, že tyto údaje jsou při nízkých koncentracích nepřesné a při vyšších teplotách jsou stále nespolehlivější. Kombinace současných výsledků s vybranými údaji z literatury poskytla spolehlivou stavovou rovnici pro Li_2SO_4 (aq) pokrývající teplotní a tlakové rozsahy $323,15 \leq T / \text{K} \leq 573,15$ a $0,1 \leq p / \text{MPa} \leq 40$. Objemové chování Li_2SO_4 (aq) se zjistilo, že se dramaticky liší od toho na Na_2SO_4 (aq) a K_2SO_4 (aq), zejména při vyšších teplotách, vyšších koncentracích a nižších tlacích, což odráží výjimečný charakter hydratace lithium iontů. Isobarická rozširitelnost ukázala, že Li_2SO_4 (aq) zůstává výrobcem vodní struktury za zkoumaných podmínek.