

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 6, Number 304 (2015), 62 – 65

ON CLUSTER MODEL OF WATER UNDER NONEQUILIBRIUM CONDITIONS

K. K. Makesheva

Kazakh national research technical university after. K. I. Satpayev, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: mami_yep@yahoo.com

Keywords: molecular structure of liquid water, water cluster model, self-organization, entropy.

Abstract. The thermodynamic analysis of non-uniform structure of liquid water is given in the paper. New interpretation of water as an interactive system, which constantly organizes itself, is offered. The anomalous properties of water features, which are explained by its molecular structure. Cluster model provides the most complete explanation of the nonequilibrium state of the water.

УДК 546 – 12 (076)

О КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ ВОДЫ В НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ

К. К. Макешева

Казахский национальный исследовательский технический университет им. К. И. Сатпаева,
Алматы, Казахстан

Ключевые слова: молекулярная структура жидкой воды, кластерная модель воды, самоорганизация, энтропия.

Аннотация. В работе дан термодинамический анализ неоднородной структуры жидкой воды. Предлагается новая интерпретация воды как интерактивной системы, которая постоянно самоорганизуется. Рассматриваются аномальные особенности свойств воды, которые объясняются ее молекулярной структурой. Кластерная модель позволяет наиболее полно объяснить неравновесность состояния воды.

Экспериментальные и теоретические работы выделяют уникальную способность воды к структурообразованию и высокую чувствительность к внешним воздействиям. Практически все свойства воды аномальны, а многие не подчиняются характеру тех законов физики и химии, которые управляют другими веществами [1].

Первая особенность воды: теплоемкость аномально высока, отсюда вытекает удивительная возможность воды сохранять тепло.

Вторая особенность: вода – единственное вещество, для которого зависимость удельной теплоемкости от температуры имеет минимум около 37 °C.

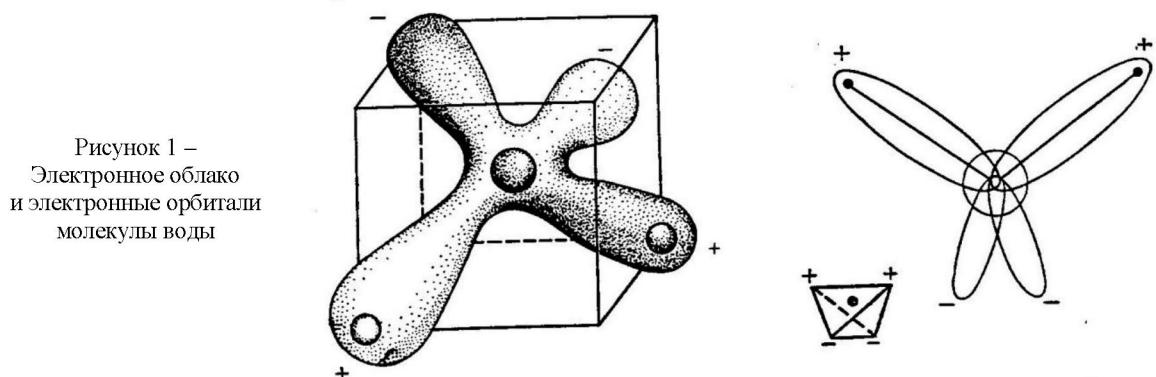
Третья особенность: вода обладает высокой удельной теплотой плавления, то есть воду очень трудно заморозить, а лед растопить. Благодаря этому климат на Земле в целом стабилен.

Четвертая особенность: максимальная плотность воды наблюдается при температуре 4 °C, а не при температуре замерзания 0 °C (талая вода). Необычное поведение плотности воды важно для поддержания жизни на Земле.

Пятая особенность воды: она сильнее других жидкостей растворяет любые вещества, если ей дать время. Именно из-за этой растворяющей способности никому до сих пор не удается получить химически чистую воду.

Шестая особенность: только в водной среде возникают гидрофобные взаимодействия, играющие большую роль в химических и биологических средах и в технологиях. (рождение а-структур у белков и нуклеиновых кислот). Сейчас активно исследуется феномен памяти воды. Нельзя ли использовать воду для хранения памяти? Битам и байтам могли бы соответствовать кластеры воды.

Таким образом, многие странные свойства воды, очевидно, обусловлены ее особой молекулярной структурой. Ее молекулы это диполи с отрицательным центром – атомом кислорода и двумя положительными центрами – атомами водорода (рисунок 1).



В жидкой воде эти диполи находятся в постоянном движении. Стоит им сблизиться, как между ними образуется водородный мостик (связь). Любая молекула воды может притянуть к себе четыре других. Так возникает целая сеть, структура из молекул.

Итак, молекулы обладают уникальным свойством объединяться в кластеры (группы) $(H_2O)^N$, где N – число молекул (рисунок 2).

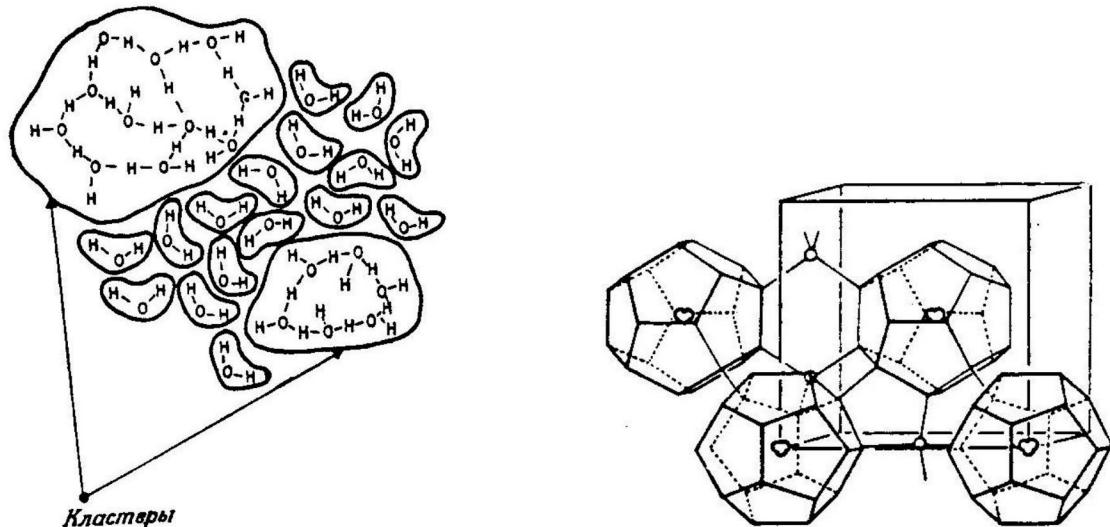


Рисунок 2 – Структура жидкой воды в модели мерцающих кластеров Фрэнка – Вина

Рисунок 3 – Автоклатратная модель жидкой воды

Было предложено большое число моделей (Бернал, Фаулер, Полинг, Самойлов и т.д.). Эти модели можно условно разбить на три группы [2].

1) кластерные, предполагающие наличие в воде двух различающихся по свойствам микрофаз, по крайней мере в одной из них молекулы соединены водородными связями;

2) клатратные, постулирующие существование в воде непрерывного каркаса из молекул, соединенных водородными связями, содержащими пустоты, в которых располагаются дополнительно молекулы воды (рисунок 3);

3) континуальные, предполагающие существование непрерывного каркаса из молекул воды, которые соединены водородными связями, в каркасе не содержится участков другой фазы, отсутствуют пустотные молекулы. Общим для всех моделей является картина воды: молекулы образуют открытую динамическую пространственную сетку, в которой образуются кластеры (H_2O) N , которые могут рождаться, разрушаться.

Под кластером понимают группу молекул, объединенных водородными связями в единый ансамбль. Прямое наблюдение кластеров ограничено. При комнатной температуре степень ассоциации N для воды составляет от 3 до 6.

Таким образом, вода – сложная жидкость, составленная из повторяющихся групп, содержащих от 3 до N одинаковых групп (рисунок 4).

Именно поэтому вода имеет аномальное значение температуры плавления. По правилам температура должна быть не выше -100°C , на самом деле равна 0°C . Температура кипения воды должна быть -75°C , а фактически равна $+100^\circ\text{C}$.

При испарении воды кластеры распадаются и превращаются в газ.

Все эти странные физические и химические свойства есть следствие структурной неоднородности воды. Жидкая вода представлена ансамблем мерцающих кластеров, состоящих из соединенных водородными связями молекул, плавающих в свободной воде. Важно отметить, что образование одной связи создает условия для возникновения новых связей и связь распространяет сама себя через соседние молекулы (эффект домино). Образование кластера является кооперативным процессом. Время жизни кластера порядка 10^{-10} С , что соответствует времени релаксационных процессов в воде, это время в 1000 раз больше периода молекулярных колебаний.

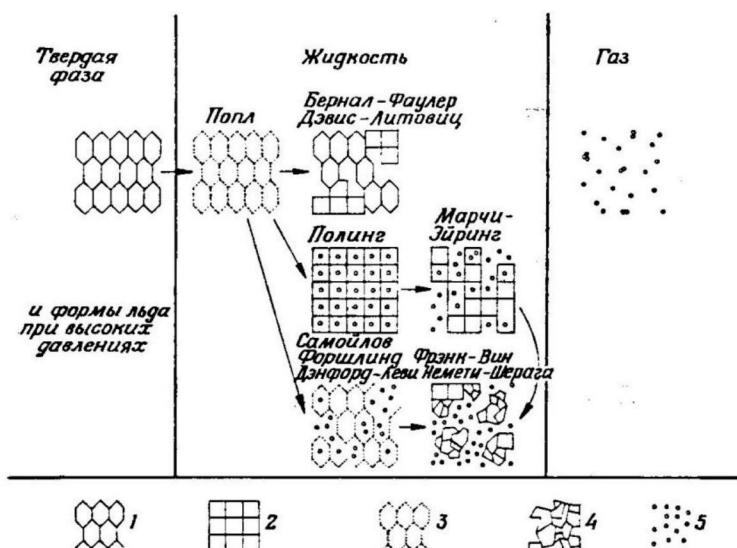


Рисунок 4 – Основные теории структуры воды:

1 – кристаллическая решетка льда-I; 2 – кристаллические решетки, отличающиеся от льда-I; 3 – искаженная или разрушенная решетка льда-I; 4 – беспорядочно связанные молекулы воды; 5 – мономерные молекулы воды

Если бы вода состояла из одних молекул и не было процесса образования и распада кластеров, то такое состояние было бы равновесным и характеризовалось бы максимумом энтропии и минимумом свободной энергии. Следовательно, структурные неоднородности в пространстве и во времени есть следствие неравновесности состояния воды, в котором энтропия имеет минимум, а свободная энергия максимум [3]. По расчетным данным Немети и Шерага с повышением температуры воды величина энтропии возрастает, а свободная энергия уменьшается. Увеличение температуры воды сопровождается разрывом водородных связей и распадом кластеров.

Резюмируя, можно отметить, что такая сложная по составу (ансамбль кластеров) интерактивная система постоянно самоорганизуется, стремясь достичь некоторого критического состояния, в котором малое событие (разрыв связи) может вызвать цепную реакцию, способную повлиять на любое число элементов системы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Хорн Р. Морская химия. – М.: Мир, 1972. – 400 с.
- [2] Вода: структура, состояние, сольватация. Достижения последних лет / Под ред. А. М. Кутепова. – М.: Наука, 2003. – 404 с. (Серия «Проблемы химии растворов»).
- [3] Макешева К.К., Канатчинов А.К. Структура воды как открытая система в неравновесных условиях // Материалы III Межд. конф. «Актуальные проблемы механики и машиностроения». – Алматы: КазНТУ им. К. И. Сатпаева, 2009. – Т. 3. – С. 256-259.

REFERENCES

- [1] Horn R. Marine Chemistry. M.: Mir, 1972. 400 p. (in Russ.)
- [2] Water: structure, state, solvation. Achievements in recent years. Ed. A. M. Kutepov. M.: Nauka, 2003. 404 p. (Series "Problems of Solution Chemistry") (in Russ.)
- [3] Makesheva K.K., Kanatchinov A.K. The structure of water as an open system under nonequilibrium conditions. Proceedings of the III Intern. Conf. "Actual problems of mechanics and engineering". Almaty: KazNTU after K. I. Satpayev, 2009. Vol. 3. P. 256-259. (in Russ.)

**ТЕПЕТЕҢДІКСІЗ ЖАҒДАЙЫНДА
СУ КЛАСТЕРЛІК МОДЕЛІ ТУРАЛЫ**

К. К. Макешева

Қ. И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

Тірек сөздер: молекуларлық сұйық су құрылымы, су кластерлік моделі, өзін-өзі ұйымдастыру, энтропиясы.

Аннотация. Жұмыста сұйық судың біртекті құрылымының термодинамикалық анализі берілген. Судың жана интерпретациясы әрқашан да өзінше ұйымдастырылатын интерактивті жүйе ретінде ұсылынады. Су қасиеттердің аномалдық ерекшеліктері қаралады, олардың молекуларлық құрылымы түсіндіріледі. Кластерлік моделі су тепетендіксіз жағдайды ең толық түсініктеме береді.

Поступила 03.11.2015 г.