

**REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN**

ISSN 2224-5227

Volume 5, Number 315 (2017), 53 – 62

M.T. KazievM.Auezov SKSU, Shymkent
kaziev1948@bk.ru**QUANTUM THEORY OF THE LIQUID STRUCTURE
OF CONDITION SUBSTANCES**

Abstract. The goal of this work - determine the true structure of substances in the liquid condition. There is proposed a new theoretical model of the structure of substances in the liquid condition. The author believes that the main element that forms the liquid structure is a soft rotator. Rotator is rotating around the instantaneous center of mass of the two molecules or substances atom. The rotator is a Fermi particle having a magnetic spin, the direction of which depends on the direction of rotation of the rotator. The model is based on quantum effects and is an evolution of the direction of quantum macrophysics. It allows to logically explain many experimental facts related to the liquid condition, especially, when a substance passes from a solid state to a liquid, a large amount of energy is absorbed-the heat of fusion, what is the physical meaning of the critical point, critical temperature, internal pressure. On the basis of the proposed theoretical model, calculations of the parameters of the liquid quantum structure are performed, which are good in agreement with experimentally measured values of variables and conclusions of other authors

Key words: phase state; liquid phase; heat of fusion; critical point; critical temperature; internal pressure; rotator; full, potential, kinetic energy; Fermi energy; Fermi temperature; quantum energy structure; phonon heat capacity.

УДК 548. 73

М.Т. Казиев

ЮКГУ им. М Аuezова, Шымкент

**КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СТРУКТУРЫ
ЖИДКИХ СОСТОЯНИЙ ВЕЩЕСТВ**

Аннотация. Цель работы – определение истинной структуры веществ в жидком состоянии. Предложена новая теоретическая модель структуры веществ в жидком состоянии. Автор считает, что основным элементом, формирующим жидкую структуру, является мягкий ротатор. Ротатор - это вращающиеся вокруг мгновенного центра масс две молекулы или атома вещества. Ротатор является Ферми частицей, имеющей магнитный спин, направление которого зависит от направления вращения ротатора. Модель базируется на квантовых эффектах и является развитием направления квантовой макрофизики. Она позволяет логично объяснить многие экспериментальные факты, связанные с жидким состоянием, а именно, почему при переходе вещества из твёрдого состояния в жидкое происходит поглощение большого количества энергии – теплоты плавления, каков физический смысл критической точки, критической температуры, внутреннего давления. На основе предложенной теоретической модели выполнены расчёты параметров жидкой квантовой структуры, которые хорошо согласуются с экспериментально измеренными значениями величин и выводами других авторов.

Ключевые слова: фазовое состояние; жидкая фаза; теплота плавления; критическая точка; критическая температура; внутреннее давление; ротатор; полная, потенциальная, кинетическая энергии; энергия Ферми; температура Ферми; квантовая энергетическая структура; фононная теплоёмкость.

Любое вещество в зависимости от наружных параметров состояния – температуры, давления, может существовать в разных фазах. Например, в газообразной, жидкой, твёрдой фазах. Установлено, что в каждом фазовом состоянии вещество имеет разную внутреннюю структуру

строения. Различные структуры строения задают веществу отличающиеся свойства. Уже хорошо теоретически обоснована и экспериментально подтверждена структура строения вещества в газовой фазе [1]. В деталях построена структурная теория твёрдых состояний веществ [2]. Однако до сих пор нет совершенной и непротиворечивой теории структуры строения веществ в жидком состоянии. И в первую очередь, не выяснено, из каких структурных элементов формируется жидкое состояние. Незнание истинной структуры не позволяет нам логично объяснить многие факты, связанные с жидким состоянием. Например, чем отличается жидкая структура вещества от кристаллической структуры твёрдого состояния, ведь плотности этих фаз почти одинаковы. Какие силы позволяют жидкости сохранять свой объём, ведь гравитационные силы притяжения между молекулами и атомами очень малы. Почему при переходе вещества из твёрдого состояния в жидкое всегда имеет место поглощение большого количества энергии (теплоты плавления). Почему до критической точки в диаграммах состояний веществ имеется зона парообразования, а после критической точки такой зоны нет. По каким причинам происходит переход вещества из жидкого состояния в газовую фазу в зоне расположенной выше критической точки. Какой физический смысл имеет критическая точка.

Накоплен огромный материал экспериментальных исследований свойств различных веществ в жидком состоянии. В частности, для многих жидких веществ, часто используемых на практике, составлены термодинамические таблицы их свойств. В них представлены экспериментально измеренные теплоты плавления, закономерности изменения теплоты парообразования, теплоёмкости, теплопроводности, удельного объёма, значения критических точек существования жидкого состояния.

Учёными отмечено, что в жидком состоянии существует только "ближний порядок". Он означает, что регулярное расположение имеют лишь небольшая группа молекул вещества, и дальше этот порядок уже не распространяется. Кроме того, установлено, что жидкости имеют "свободные объёмы", доля которых составляет 0,5% от объёма жидкости при обычной температуре и возрастает до 50% вблизи критической точки. Установлено [3], что в естественных условиях все жидкости изотропны. Они имеют только одну структурную модификацию. Это означает, что внутренняя структура всех веществ в жидком состоянии одинакова. В твёрдой фазе отдельное вещество может иметь несколько модификаций внутренней структуры. Например, углерод в твёрдом состоянии может иметь три структуры. Этим структурам соответствуют состояния углерода в виде графита, алмаза, нано-трубок. Модификации твёрдой структуры вещества двуокиси кремния (SiO_2), существуют в виде кварца, тридимита, кристадолита. Каждая структурная модификация задаёт веществу разные свойства.

Известны следующие теоретические модели, через которые пытаются описать структуру строения жидкого состояния веществ [3,4]:

- 1) решеточная теория жидкостей, которая развивается в двух направления – в форме теории свободных объёмов и в виде так называемой дырочной теории;
- 2) через интеграл взаимодействия множества частиц;
- 3) через радиальную функцию распределения.

Все эти модели базируются на том, что внутренняя структура жидкого состояния вещества, формируется отдельными молекулами или атомами.

В данной работе предлагается новое направление теоретического описания внутренней структуры состояния веществ в жидком состоянии. Оно базируется на квантовых эффектах и является развитием направления **квантовой макрофизики**. Поиск истинной модели структуры жидких состояний привёл меня к выводу, что основным элементом, формирующим жидкую структуру, является мягкий ротатор. Ротатор это вращающиеся вокруг мгновенного центра масс две молекулы или атома. При переходе вещества из твёрдого состояния в жидкую фазу освобождающиеся из разрушенной кристаллической решётки молекулы, атомы объединяются во вращающиеся пары – мягкие ротаторы. В результате возникает жидкая структура, состоящая из множества ротаторов. Мягкий ротатор называем потому, что он может изменять свой размер (диаметр) при поглощении энергии. Ротаторы являются Ферми частицами. Они имеют магнитный спин ориентация, которого зависит от направления вращения ротатора. Ротаторы формируют новую квантовую жидкую структуру, которая кардинально отличается от имевшей место

кристаллической структуры твёрдой фазы. Создание ротаторной жидкой структуры требует много энергии. Она необходима для размещения ротаторов по энергетическим уровням в соответствии с запретом Паули (по два или одному ротатору на один энергетический уровень). Такой структурой из Ферми ротаторов можно логично объяснить большинство свойств жидких состояний веществ.

Объединению атомов, молекул во вращающиеся пары способствуют силы Шпольского [5]. Они имеют электрическое происхождение. Их создаёт электронная поляризация, порождаемая нулевыми колебаниями электронов в молекулах, атомах. Вращение молекул, атомов с нулевыми колебаниями зарядов создают в ротаторе кольцевой переменный ток. Этот ток порождает вокруг каждого ротатора магнитное поле. Магнитные поля ротаторов накладываются друг на друга и в области между ротаторами, образуют результирующее магнитное поле. Ориентация вращения ротаторов в жидкости жёстко не ограничена. Поэтому в жидкой структуре вращение их самопроизвольно ориентируется так, чтобы их магнитные поля, объединяясь, создали мощное результирующее магнитное поле. Это поле прижимает ротаторы друг к другу, создавая внутреннее давление. Оно уравнивает кинетическую энергию ротаторов. Кинетическая энергия ротатора складывается из кинетических энергий вращения и поступательного движения. Внутреннее давление не даёт возможность ротаторам вырваться из объёма жидкости и регламентирует размер (диаметр) ротатора за счёт уравнивания центробежного давления от вращающихся в нём молекул, атомов. Внутреннее давление обеспечивает жидкости сохранение своего объёма. Оно не действует на тела, погружённые в жидкость, а действует только на ротаторы.

Полная внутренняя энергия ротатора складывается из кинетической и потенциальной энергий. Кинетическую энергию ротаторов, на примере воды, в момент образования жидкой фазы, определим следующим образом. Сразу отметим, что все нижеследующие расчёты будут относиться к 1 кг воды. Вначале определим, сколько энергии вносит в кинетическую энергию жидкой фазы лёд, имеющий $t=0^{\circ}\text{C}$ ($T = 273^{\circ}\text{K}$)

$$Q_{\text{л}} = C_{\text{л}} \cdot \Delta T = 2100 \cdot (273 - 0) = 573300 \text{ Дж}$$

где $C_{\text{л}} = 2100 \text{ Дж/кг} \cdot \text{град}$ – теплоёмкость льда [6]; $\Delta T = 273$ – на сколько градусов увеличилась температура льда от 0 градуса шкалы Кельвина.

Попытка согласовать полученную величину кинетической энергии с экспериментальными данными справочных таблиц [7] показала, что этой энергии недостаточно для образования квантовой структуры. Поэтому для создания жидкой структуры происходит поглощение дополнительной энергии – теплоты плавления.

$$Q_{\text{пл}} = r_{\text{пл}} \cdot G_{\text{в}} = 334000 \cdot 1 = 334000, \text{ Дж}$$

где $r_{\text{пл}} = 334000$ – теплота плавления льда, Дж/кг; $G_{\text{в}} = 1 \text{ кг}$ воды.

С учётом теплоты плавления кинетическая энергия ротаторов воды при $t=0^{\circ}\text{C}$ (момент образования) будет составлять:

$$K = Q_{\text{л}} + Q_{\text{пл}} = 573300 + 334000 = 907300, \text{ Дж.}$$

Потенциальная энергия ротаторов воды фигурально выражает потенциальный колодец с $g \cdot N_{\text{р}}$ энергетическими уровнями. Эти уровни могут заполняться ротаторами при увеличении их кинетической энергии. Энергетическую ёмкость такого потенциального колодца количественно можно оценить по теплоте парообразования. Например, по справочнику [7] при $t=0^{\circ}\text{C}$ теплота парообразования воды составляет:

$$П = 2501000, \text{ Дж/кг.}$$

Это значит, что заполняя потенциальный колодец, кинетическая энергия ротаторов 1 кг воды максимально может увеличиться на 2501000 Дж.

Суммируя кинетическую и потенциальную энергии ротаторов, найдём полную внутреннюю энергию 1 кг ротаторной воды при $t=0^{\circ}\text{C}$ ($T = 273^{\circ}\text{K}$):

$$E = K + П = 907300 + 2501000 = 3408300, \text{ Дж}$$

Внутреннюю равновероятную энергию одного ротатора можно найти делением полной внутренней энергии ротаторной воды на число ротаторов:

$$3408300/1,672 \cdot 10^{25} = 20,384 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

где $1,67 \cdot 10^{25}$ – число ротаторов в 1 кг жидкости (определяется как число пар молекул или атомов в 1 кг воды).

Поступающая в жидкость тепловая энергия поглощается ротаторами. Это приводит к увеличению (трансляционной) кинетической энергии ротатора за счёт уменьшения потенциальной энергии. Ротаторы начинают заполнять свободные энергетические уровни потенциального колодца.

Среднюю, равновероятную кинетическую энергию одного ротатора воды – E_K , при $t=0^\circ\text{C}$ можно определить так:

$$E_K = 907300/1,672 \cdot 10^{25} = 5,426 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

где $1,67 \cdot 10^{25}$ – число ротаторов в одном кг воды.

На каждом энергетическом уровне в момент образования квантовой Ферми структуры, в соответствие с запретом Паули будет находиться по 2 ротатора с разными магнитными спинами. Поэтому средняя энергия одного энергетического уровня (состояния) квантовой структуры будет равна

$$5,426 \cdot 10^{-20} \cdot 2 = 10,852 \cdot 10^{-20} \text{ Дж.}$$

Зная среднюю кинетическую энергию уровня, по известным выражениям для квантовых структур, можно определить энергию Ферми - $E_{f(0)}$ и температуру Ферми - T_f :

$$E_{f(0)} = 10,852 \cdot 10^{-20} / 0,6 = 18,086 \cdot 10^{-20} \text{ Дж – энергия Ферми}$$

$$T_f = 18,086 \cdot 10^{-20} / 1,38 \cdot 10^{-23} = 13106,28 \text{ } ^\circ\text{K – температура Ферми}$$

где $1,38 \cdot 10^{-23}$ – постоянная величина Больцмана.

Зная кинетическую энергию ротатора, мы можем теоретически оценить величину внутреннего давления в воде, например, при $t = 0^\circ\text{C}$.

Объём занимаемый одним ротатором воды, при $t = 0^\circ\text{C}$, определим следующим образом. Для этого 1 м^3 воды разделим на количество ротаторов в нём

$$V_p = \frac{1}{1,67 \cdot 10^{28}} = 5,988 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$$

где $1,67 \cdot 10^{28}$ – число ротаторов в одном м^3 воды.

Этот объём определяет пространство, в котором ротатор перемещается и вращается.

Система находится в равновесии. Математически такое равновесие можно выразить так

$$P_{\text{маг}} = P_p \quad (1)$$

где $P_{\text{маг}}$ – внутреннее давление (создано магнитным полем); P_p – давление, создаваемое кинетической энергией ротаторов.

Давление от кинетической энергии можно оценить по известной формуле

$$P_p = \frac{2 \cdot E_K \cdot n}{3} = \left| n = \frac{N}{V} \text{ или } n = \frac{1}{V} = \frac{1}{V_p} \right| = \frac{2 \cdot E_K}{3 \cdot V_p}$$

где E_K – кинетическая энергия ротатора; n – удельное число ротаторов в единице объёма; N – число ротаторов в объёме V ; V – объём жидкости; V_p – объём занимаемый одним ротатором.

Учитывая, что внутреннее давление направленно только в одну сторону, уравнение примет вид (вместо 2 будет единица)

$$P_p = \frac{1 \cdot E_K}{3 \cdot V_p} \quad (2)$$

Подставляя значения P_p в формулу (1), рассчитаем величину внутреннего давления

$$P_p = \frac{1 \cdot E_K}{3 \cdot V_p} = \frac{1 \cdot 5,426 \cdot 10^{+20}}{3 \cdot 5,988 \cdot 10^{-29}} = 3,02 \cdot 10^8 \text{ Па или } 3020 \text{ атм.}$$

где E_K – кинетическая энергия ротатора при $t = 0^\circ\text{C}$.

Понятие внутреннего давления в воде рассмотрено в монографии [8] В ней отмечено, что эта величина в жидкостях огромна. Например, в воде при $t = 50^\circ\text{C}$ составляет 3318 атм. Эта хорошо соответствует расчёту по нашей теоретической модели.

В момент поглощения энергии жидкостью происходит следующее:

- кинетическая энергия ротаторов увеличивается за счёт уменьшения его потенциальной энергии, и они последовательно начинают заполнять свободные энергетические уровни потенциального колодца;

- при заполнении ротаторами свободных энергетических уровней остаются неизменными полная внутренняя энергия ротатора и число ротаторов.

Нами установлены следующие два закона. Пока средняя кинетическая энергия ротатора меньше средней кинетической энергии квантовой структуры – $E_f \cdot 0,6$ вероятность заполнения ротаторами энергетического уровня описывается уравнением

$$g = \frac{E_f \cdot 0.6}{E_{K(\Phi)}} \quad (3)$$

Т.е. величину вероятности определяет закономерность структуры ротаторов расположенных ниже уровня энергии Ферми.

Как только средняя кинетическая энергия ротатора станет равной и больше средней кинетической энергии квантовой структуры – $E_f \cdot 0,6$, вероятность заполнения ротаторами энергетического уровня начинает описывать другое уравнение

$$g = \frac{E_f \cdot 0.5}{E_{K(\Phi)}} \quad (4)$$

Т.е. теперь величину вероятности определяет структура ротаторов расположенных выше уровня энергии Ферми.

В уравнениях (3) и (4): величина $E_{K(\Phi)}$ это фактическая средняя кинетическая энергия ротатора с учётом квантовой структуры при разных температурах; E_f – энергия Ферми, $g = f(E) \cdot 2 \cdot V$ это вероятность заполнения ротаторами одного энергетического уровня, где: 2 – степень вырождения; V – объём занимаемый квантовой структурой; $f(E)$ – распределение Ферми-Дирака, описывающее вероятность заполнения ротатором энергетического уровня в соответствии с запретом Паули.

Следует отметить, что с увеличением температуры, одновременно, в 3,1 раза увеличивается объём - V жидкой фазы. Например: $t=0^\circ\text{C}$, $V = V_0/V_t = 1000/1000 = 1$; $t=100^\circ\text{C}$, $V = 1000/958 = 1,043$; $t=200^\circ\text{C}$, $V = 1000/864 = 1,157$; $t=300^\circ\text{C}$, $V = 1000/712,7 = 1,403$; $t=374^\circ\text{C}$, $V = 1000/322,6 = 3,1$ где V_0 – объём воды (м^3) при $t=0^\circ\text{C}$; V_t – объём воды при температуре t .

Распределение Ферми-Дирака $f(E)$ обеспечивает условие сохранения полной энергии ротатора и постоянство числа ротаторов в Ферми структуре.

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}} + 1} \quad (5)$$

где E – трансляционная энергия ротатора при различных температурах; E_f – энергия Ферми; k – постоянная Больцмана ($k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$); T – температура жидкой квантовой структуры.

При расчётах квантовой структуры для расчёта числа энергетических уровней n_y будем использовать уравнение

$$n_y = \frac{E_{\text{ПОЛН}}}{g \cdot E_{K(\Phi)}} \quad (6)$$

где $E_{\text{полн}}$ – полная энергия квантовой структуры при разных температурах; g – вероятное количество ротаторов на одном энергетическом уровне при разных температурах; $E_{K(\Phi)}$ – средняя фактическая кинетическая энергия ротатора с учётом квантовой вероятности распределения ротаторов по энергетическим уровням структуры, при разных температурах.

Фактическая средняя квантовая кинетическая энергия ротаторов - $E_{K(\Phi)}$ будет отличаться от средней с равной вероятностью кинетической энергии ротаторов – E_K . Её величину можно определить из условия, что полная внутренняя энергия ротатора при поглощении энергии остаётся неизменной. Ниже представлен расчёт значения $E_{K(\Phi)}$ при разных температурах

$$t = 0^\circ\text{C}. E_{K(\Phi)} = 20,384 \cdot 10^{-20} - 14,968 \cdot 10^{-20} = 5,426 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

$$t = 100^\circ\text{C}. E_{K(\Phi)} = 20,384 \cdot 10^{-20} - 13,5 \cdot 10^{-20} = 6,884 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

$$t = 200^\circ\text{C}. E_{K(\Phi)} = 20,384 \cdot 10^{-20} - 11,596 \cdot 10^{-20} = 8,788 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

$$t = 300^\circ\text{C}. E_{K(\Phi)} = 20,384 \cdot 10^{-20} - 8,391 \cdot 10^{-20} = 11,993 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

$$t = 374^\circ\text{C}. E_{K(\Phi)} = 20,384 \cdot 10^{-20} - 2,427 \cdot 10^{-20} = 17,957 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$$

где $20,384 \cdot 10^{-20}$ – полная внутренняя энергия ротатора; $14,968 \cdot 10^{-20}$, $13,5 \cdot 10^{-20}$, $11,596 \cdot 10^{-20}$, $8,391 \cdot 10^{-20}$ – теплоты парообразования из таблиц экспериментальных измерений.

Теплота парообразования $2,427 \cdot 10^{-20}$ введена нами принудительно. Это обусловлено тем, что структура мгновенно разрушается в момент, когда потенциальная энергия ещё имела место. Структура разрушается потому, что при $t = 374^\circ\text{C}$ ротаторы заполняют все возможные энергетические уровни – gN . Структура насыщается и при дальнейшем поступлении энергии она мгновенно разрушается. Ротаторы распадаются на молекулы, атомы, а магнитное поле исчезает. Поэтому введённую нами величину экспериментально измерить невозможно.

Для проверки постоянства числа ротаторов нами получено уравнение. Оно выведено из уравнения (6)

$$n_y = \frac{E_{\text{полн}}}{g \cdot E_{K(\Phi)}} = |E_{\text{полн}} = N \cdot E_K| = \frac{N \cdot E_K}{g \cdot E_{K(\Phi)}}$$

Из последнего выражения получаем

$$N = \frac{n_y \cdot g \cdot E_{K(\Phi)}}{E_K} \quad (7)$$

Учтём, что с увеличением температуры системы, незначительно уменьшается величина $E_{f(0)}$. Эту величину уменьшения можно оценивать по известной формуле

$$E_{f(t)} = E_{f(0)} \cdot \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_{f(0)}} \right)^2 \right]$$

где $E_{f(t)}$ – энергия Ферми при t ; $E_{f(0)}$ – энергия Ферми при $t=0^\circ\text{C}$.

Таблица 1 - Выполним расчёты квантовой жидкой структуры по нашей теории и результаты расчётов внесём в таблицу 1

$t, ^\circ\text{C}$	$E_{f(t)}, \text{ Дж}$	$E_K, \text{ Дж}$	$E_{K(\Phi)}, \text{ Дж}$	g	$n_y, \text{ шт}$	$N_p, \text{ шт}$	$E_{\text{полн}}, \text{ Дж}$
0	$18,086 \cdot 10^{-20}$	$5,426 \cdot 10^{-20}$	$5,426 \cdot 10^{-20}$	2	$0,836 \cdot 10^{25}$	$1,672 \cdot 10^{25}$	907227
100	$18,014 \cdot 10^{-20}$	$7,933 \cdot 10^{-20}$	$6,884 \cdot 10^{-20}$	1,57	$1,227 \cdot 10^{25}$	$1,6716 \cdot 10^{25}$	1326126,87
200	$17,968 \cdot 10^{-20}$	$10,524 \cdot 10^{-20}$	$8,788 \cdot 10^{-20}$	1,227	$1,632 \cdot 10^{25}$	$1,672 \cdot 10^{25}$	1757608,78
300	$17,915 \cdot 10^{-20}$	$13,473 \cdot 10^{-20}$	$11,993 \cdot 10^{-20}$	0,747	$2,514 \cdot 10^{25}$	$1,6716 \cdot 10^{25}$	2252235,03
374	$17,867 \cdot 10^{-20}$	$17,957 \cdot 10^{-20}$	$17,957 \cdot 10^{-20}$	0,497	$3,364 \cdot 10^{25}$	$1,672 \cdot 10^{25}$	3002245,19

Таблица показывает, что в теоретических расчётах соблюдается постоянство числа ротаторов и полной энергии ротатора, а рассчитанная полная энергия 1кг ротаторной воды - $E_{\text{полн}}$ совпадает с экспериментально измеренными значениями при разных температурах.

Процессы испарения и кипения в ротаторной жидкости протекают следующим образом. Ротаторы, находящиеся на Ферми уровнях, имеют наибольшую кинетическую энергию движения по сравнению с ротаторами других уровней. Такие ротаторы, находясь у поверхности жидкости, могут выскакивать из жидкости. Попадая в пространство над жидкостью, где на них перестаёт действовать сжимающие усилия других ротаторов, они разрушаются. Молекулы, атомы из разрушенных ротаторов образуют над поверхностью жидкости пар. Так происходит испарение. Молекулы, атомы пара беспорядочно двигаются над поверхностью жидкости и некоторые из них возвращаются в жидкость, где снова объединяются в пары с образованием ротаторов. Т.о. над поверхностью жидкости при испарении образуется равновесное количество пара. Это количество зависит от температуры жидкости. Чем больше температура жидкости, тем больше равновесного пара над ней. Пока жидкость не прогрелась до температуры кипения, испарение происходит только с поверхности жидкости. Разрушение ротаторов внутри объёма жидкости отсутствует. Как только температура жидкости достигнет температуры кипения, ротаторы Ферми уровня начинают разрушаться внутри жидкости. Молекулы, атомы из разрушенных ротаторов создадут внутри жидкости паровые пузыри. Они под действием выталкивающей силы Архимеда, начнут всплывать к поверхности. Так зарождается кипение. Т.к. в молекулах, атомах имеются никогда не прекращающиеся пульсация зарядов (нулевые колебания), то магнитное поле будет оказывать сопротивление подъёму молекул, атомов парового пузыря. Для нейтрализации этого сопротивления молекулы, атомы поглощают энергию извне в виде фотонов, фононов. Преодолев сопротивление магнитного поля молекулы, атомы выходят из объёма жидкости и становятся свободными. Количество энергии, полученное молекулами, атомами при преодолении сопротивления магнитного поля, эквивалентно теплоте парообразования.

Зная внешнее давление на поверхность жидкости и температуру кипения жидкости, можно определить размер ротатора в момент разрушения. Например, при атмосферном давлении $P=10^5$ Па температура кипения воды равна 100°C . Энергия ротатора при $t=100^\circ\text{C}$ и $P_H=10^5$ Па, согласно опытным таблицам парообразования, равна

$$E_p = 6,693 \cdot 10^{-20}, \text{ Дж.}$$

Тогда условие разрушения ротатора при кипении можно записать так

$$P_H = \frac{2}{3} \cdot \frac{E_p}{V_p}, \text{ Н/м}^2$$

Отсюда можно найти размеры ротатора

$$V_p = \frac{2}{3} \cdot \frac{E_p}{P_H} = \frac{2}{3} \cdot \frac{6,693 \cdot 10^{-20}}{1 \cdot 10^5} = 4,462 \cdot 10^{-25} \text{ м}^3$$

Ротатор имеет шаровую форму, поэтому радиус ротатора будет равен

$$r_p = \left(V_p \cdot \frac{3}{4\pi} \right)^{0,333} = \left(4,462 \cdot 10^{-25} \cdot \frac{3}{4 \cdot 3,14} \right)^{0,333} = 4,83 \cdot 10^{-9}, \text{ м}$$

Это вполне реальный размер.

Нужно учитывать, что увеличение кинетической энергии ротаторов при возрастании температуры и давления приводит к уменьшению доли потенциальной энергии магнитного поля, а это приводит к уменьшению затрат энергии на парообразование. Это и демонстрируют экспериментальные таблицы состояний пара веществ, например, для воды.

Т.о. ротаторная структура позволяет нам объяснить и такие особенности в структуре состояний жидкости, как причина возникновения парообразования и почему её величина уменьшается с увеличением температуры и давления.

Согласно диаграммам состояний веществ ниже критической точки имеется зона парообразования, а выше критической точки она исчезает. Это явление можно объяснить

следующим образом. Ротаторная структура, по аналогии со структурой Ферми частиц, может иметь определённое максимальное число энергетических уровней. Такой наивысший энергетический уровень – $E_{\max}$ называют потолком энергетической структуры. Наличие этого уровня следует из того факта, что в Ферми энергетической структуре не может быть уровней более чем $N_p \cdot g$, где: N_p – число ротаторов; g – степень вырождения (для ротаторов $g = 2$). При заполнении ротаторами всех $N_p \cdot g$ энергетических уровней, ротаторная структура становится насыщенной и больших значений энергии в ней быть не могут. Дальнейшее поступление энергии, приводит к мгновенному разрушению ротаторной структуры. В этот момент ротаторы мгновенно разрушаются, исчезает магнитное поле и молекулы, атомы из разрушенных ротаторов становятся свободными. Эта ситуация соответствует критической точке.

Теплоемкость ротаторной воды. Сразу отметим, что вклад Ферми ротаторов в теплоемкость воды, как и электронов в металле, минимальный. Основную величину теплоемкости ротаторной воде, задает фононный газ между ротаторами, молекулами и атомами. В ротаторной жидкости между ротаторами действует силовое поле прижимающее ротаторы друг к другу (это внутреннее давление). Внутреннее давление, как мы отметили выше, создает суммарное магнитное поле вокруг ротаторов. Одновременно между молекулами, вращающимися внутри ротаторов, также действует сила, удерживающая молекулы на орбите. Эту силу называют силой Шпольского. Молекулы и атомы, составляющие ротаторы, совершают колебания около положения равновесия. Эти колебания рождают в силовых полях фононный газ, который и является причиной высокой теплоемкости воды. Температура существования ротаторной воды намного выше температуры Дебая. Поэтому фононную теплоемкость можно описать не законом Дебая, а законом Дюлонга-Пти. Подсчитаем эту теплоемкость. Ротатор, состоящий из двух молекул и атомов, входящие в состав молекул, совершают акустические колебания. Подсчитаем число степеней свободы (число путей, по которым вода может принимать энергию) ротаторной воды – n .

$n = 3 \cdot N_p$, где 3 – это виды поляризации акустических волн от ротатора и всех частиц входящих в состав ротатора (три волны: одна продольная и две поперечные); N_p – число ротаторов.

В ротаторе вращаются две молекулы воды. Поэтому число степеней свободы будет больше на 2.

$$n = 3 \cdot N_p \cdot 2 = \left| N_p = \frac{N_A}{2} \right| = 3 \cdot N_A, \text{ где } N_A - \text{число Авогадро для моля воды.}$$

В одной молекуле моля воды имеются три атома: два водорода и один кислорода. В связи с этим истинное число степеней свободы будет следующим $n = 3 \cdot N_A \cdot 3 = 9 \cdot N_A$

Таким образом, теплоемкость воды по закону Дюлонга-Пти будет равна

$$C_{\phi} = 9 \cdot N_A \cdot k = 9 \cdot R,$$

где R – универсальная газовая постоянная ($R = 8,314$ Дж/мол·К).

Оценим фононную теплоемкость.

$$C_{\phi} = 9 \cdot 8,314 = 74,826 \text{ Дж/мол} \cdot \text{К, или } 74,826/18 = 4,157 \text{ Дж/г} \cdot \text{К}$$

Ротатор вращается. Поэтому к этой теплоемкости прибавляем вращательную степень свободы – C_B . На вращательную степень свободы обычно тратится половина кинетической энергии ротатора т.е.

$$C_B = 0,5 \cdot N_p \cdot k = 0,5 \cdot \frac{N_A}{2} \cdot k = 0,5 \cdot \frac{R}{2} = 0,5 \cdot \frac{8,314}{2} = 2,078 \text{ Дж/мол} \cdot \text{К}$$

или $2,078:18=0,115$ Дж/г·К

Теплоемкость с учетом колебательной и вращательной степени свободы составит

$$C = C_{\phi} + C_B = 4,157 + 0,115 = 4,27 \text{ Дж/г} \cdot \text{К}$$

Это очень близко к опытным значениям [7].

При нагревании вода расширяется. Например, при $t = 374$ °С её объём увеличивается в 3,1 раза. На работу расширения воды тратится энергия. Затраты энергии на расширение воды

приводит к возрастанию величины теплоемкости воды. Оценим вклад энергии расширения на величину теплоёмкости. При расширении воды энергия тратится на преодоление внутреннего давления воды.

Для расчёта внутреннего давления будем использовать уравнение (2).

$t = 0^{\circ}\text{C}$ внутреннее давление $P_p = 302 \cdot 10^6$ Па (см. выше представленные расчёты)

$$t = 100^{\circ}\text{C } P_p = \frac{1 \cdot 6,884 \cdot 10^{-20}}{3 \cdot 5,988 \cdot 10^{-29}} = 383,3 \cdot 10^6 \text{ Па}$$

$$t = 200^{\circ}\text{C } P_p = \frac{1 \cdot 8,788 \cdot 10^{-20}}{3 \cdot 5,988 \cdot 10^{-29}} = 489,3 \cdot 10^6 \text{ Па}$$

$$t = 300^{\circ}\text{C } P_p = \frac{1 \cdot 11,993 \cdot 10^{-20}}{3 \cdot 5,988 \cdot 10^{-29}} = 667,76 \cdot 10^6 \text{ Па}$$

$$t = 374^{\circ}\text{C } P_p = \frac{1 \cdot 17,957 \cdot 10^{-20}}{3 \cdot 5,988 \cdot 10^{-29}} = 999,83 \cdot 10^6 \text{ Па}$$

Оценим изменение давления на один градус Кельвина (К).

$$t = 0^{\circ}\text{C } K_p = \frac{302 \cdot 10^6}{273} = 1,106 \cdot 10^6 \text{ Па/К}$$

$$t = 100^{\circ}\text{C } K_p = \frac{383,3 \cdot 10^6}{373} = 1,03 \cdot 10^6 \text{ Па/К}$$

$$t = 200^{\circ}\text{C } K_p = \frac{489,3 \cdot 10^6}{473} = 1,034 \cdot 10^6 \text{ Па/К}$$

$$t = 300^{\circ}\text{C } K_p = \frac{667,76 \cdot 10^6}{573} = 1,16 \cdot 10^6 \text{ Па/К}$$

$$t = 374^{\circ}\text{C } K_p = \frac{999,8 \cdot 10^6}{647} = 1,54 \cdot 10^6 \text{ Па/К}$$

Если сравнивать с данными Кирилина В.А. [7], то до $t = 300^{\circ}\text{C}$ значения коэффициента почти не различаются ($K_p = 1,006 \cdot 10^6$ Па/К у Кирилина В.А. и $1,1 \cdot 10^6$ у нас). Однако при $t = 374^{\circ}\text{C}$ происходит небольшой скачок величины. Оценим вклад в теплоёмкость воды от расширения.

$$t = 0^{\circ}\text{C } C_p = K_p \cdot \Delta V = 1,106 \cdot 10^6 \cdot 0 = 0$$

Общая теплоёмкость $C = 4,272 + 0 = 4,272$ (4,2) Дж/г·К

$$t = 100^{\circ}\text{C } C_p = K_p \cdot \Delta V = 1,03 \cdot 10^6 \cdot 0,043 \cdot 10^{-5} = 0,444:18 = 0,024$$

Общая теплоёмкость $C = 4,272 + 0,024 = 4,296$ (4,2) Дж/г·К

$$t = 200^{\circ}\text{C } C_p = K_p \cdot \Delta V = 1,1034 \cdot 10^6 \cdot 0,157 \cdot 10^{-5} = 1,62:18 = 0,09 \text{ Дж/г·К}$$

$$t = 300^{\circ}\text{C } C_p = K_p \cdot \Delta V = 1,16 \cdot 10^6 \cdot 0,403 \cdot 10^{-5} = 4,67:18 = 0,259 \text{ Дж/г·К}$$

В скобках указаны экспериментально измеренные значения теплоёмкости.

Выводы:

- представлена ротаторная модель структуры веществ в жидком состоянии, которая позволяет логично объяснить многие факты, связанные с жидким состоянием;
- обоснованно, что ротаторная структура вещества в жидком состоянии, создаёт внутри жидкости магнитное поле;
- магнитное поле создаёт внутреннее давление, которое прижимает ротаторы друг к другу;
- отмечено, что теоретические расчёты по разработанной теории находятся в хорошем согласии с экспериментальными измерениями и выводами других авторов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ноздрев В.Ф. и др. Курс статистической физики. – М.: «Высшая школа», 1969. – 288 с.
- [2] Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твёрдого тела. – М.: Мир, 1969. – 558 с.
- [3] Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей. Учеб. пособие для вузов. – М.: «Выш. школа», 1971. – 256 с.
- [4] Радупкевич Л.В. Курс теоретической физики. – М.: Просвещение, 1966. – 420 с.
- [5] Шпольский Э.В. Атомная физика: Учеб. пособие для ВУЗов. – М.: Наука, 1974. – 447 с.
- [6] ДОС]Таблица « Физические свойства воды»
- [7] festival.1september.ru/articles/413997/pril5.doc
- [8] Ривкин С.Л., Александров А.А. Термодинамические свойства воды и водяного пара. Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 80 с.
- [9] Кириллин В.А. и др. Техническая термодинамика: Учебник для вузов. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 416 с.

М.Т. Казиев

Шымкент М.Ауэзова атындағы ОҚМУ

ЗАТТАРДЫҢ СҰЙЫҚ КҮЙІНДЕГІ ҚҰРЫЛЫМЫНЫҢ КВАНТТЫҚ ТЕОРИЯСЫ

Түйін. Сыртқы параметрлеріне қарай – температура, қысым, кез келген зат газ, сұйық, қатты фазаларда болады. Әр фазалық күйде зат тек әртүрлі ішкі құрылымды құрама болады. Әр түрлі құрылымдылық затқа ерекшелік қасиет береді. Қазір заттың газ фазасындағы құрылу құрылымы тәжібелі айқындалған және теориялы түсіндірілген. Заттың қатты күйінің құрылымдық теориясы жекеше түсіндірілген. Бірақ әлі күнге дейін заттың сұйық күйдегі құрылымы теориясына қарсы келмейтін және жетілген нақты жауап жоқ. Нақты құрылымын білмеу сұйық күйге байланысты көптеген құбылыстарды логикалық тұрғыдан жауап беруге мүмкіндік бермейді.

Бұл жұмыста заттардың сұйық күйдегі ішкі құрылымына теоретикалық сипаттама беретін жаңа бағыт ұсынылады. Ол кванттық эффектілерге шоғырланады және **кванттық макрофизика** бағытының дамуы болып табылады. Сұйық құрылымды жинақтайтын негізгі элемент болып жұмсақ ротатор болып табылатынын автор атап кетіп отыр. Ротатор бұл массалардың екі молекула немесе атомның бір мезеттегі центрінде айналады. Заттардың қатты күйден сұйық күйге өту кезінде бұзылған кристаллды молекула торынан босатылған атомдар айналатын жұптарға бірігеді. Ротаторлар Ферми бөлшектер болып табылады. Олар магнитті ориентацияға ие, ол өз кезегінде ротатордың айналу бағытына тәуелді болады. Ротаторлы сұйық құрылымды құру көп энергияны қажет етеді. Ол Паули тыйым салуына сәйкес ротаторларды энергетикалық деңгейі бойынша орналастыру үшін қажет. Мұндай құрылыммен заттардың сұйық күйдегі көптеген қасиеттерін түсіндіруге болады. Ротаторлы құрылым сұйық ішінде магнитті алаң құрады. Магнитті алаң ротаторларды бір-біріне жабыстыратын ішкі қысымды туғызады. Ішкі қысым сұйықтың өз көлемін сақтауды қамтамасыз етеді. Ол сұйыққа батырылған денелерге әсер етпейді, тек ротаторларға әсер етеді. Өзірленген теория бойынша теоретикалық есептер басқа авторлардың эксперименталды өлшеулері мен қорытындыларымен жақсы келісімде тұр.

Тірек сөздер: фазалық калып; сұйық фаза; балқу температурасы; критикалық нүкте; критикалық температура; ішкі қысым; ротатор; толық; потенциалды кинетикалық энергия; Ферми энергиясы; Ферми температура; кванттық энергетикалық құрылым; фононды жылусыйымдылық.

Сведения об авторе:

Казиев Мухтар Тасмуханович – к.т.н., доцент, Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова, проспект Тауке хана 5, г. Шымкент, Республика Казахстан, 160018; мобильный телефон - +77014715681; e-mail: kaziev1948@bk.ru.