

E. Г. ЕВДОКИМОВА

О СТРУКТУРЕ ФАЗОВЫХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ ВОДЫ

Прошло свыше 200 лет с момента, когда выдающиеся ученые-физики Лавуазье и Кавендиш экспериментально установили, что вода во всех ее фазовых разновидностях состоит из кислорода и водорода, и чуть более 100 лет со времени когда Гей-Люссак и Гумбольд выяснили, что в обычной воде на один атом кислорода строго приходится два атома водорода.

С тех пор, несмотря на многочисленные весьма результативные попытки [1-20], структура всеобще знакомой воды, ее твердо- и газофазных разновидностей, на сегодня все еще окончательно не установлена. Что касается жидкостной воды, выдвинуто большое множество моделей ее структуры, значительная часть которых сегодня имеет только исторический интерес [1-5]. Среди новейших моделей жидкой воды заслуживают

внимание кластерная модель Немети и Шираге [6], промежуточная модель [7], гипотическая модель Зацепиной [8], новая ячеистая модель Вереса и Райса [9], электронная структура Саймсона [10], трехмерно-каркасная структура Саркисова, Маленкова, Дашевского [11], модель термодинамически устойчивого водного ассоциата [12, 13].

Исследования последних лет показали, что внутреннее строение жидкой и твердофазной воды тесно связаны между собой. В 1892 году Рентген заметил, что связанные молекулы жидкой воды можно рассматривать как молекулы льда [14]. В работах [15-17] рентгеновскими методами установлено, что кристаллическая решетка льда аналогична тридимитоподобной модификации SiO_2 . Бъеррум [18] отмечает, что

в структуре льда шесть молекул воды – ближайшие соседи для данной пары молекул – могут быть расположены центрально симметрично или зеркально симметрично. Согласно данным [8], молекулы воды в структуре льда расположены довольно далеко, однако между ними существует водородная связь. По данным Самойлова [19], кристаллическая структура льда довольно рыхлая, и в ней имеется ряд пустот, не являющихся дефектами.

Применительно к парообразной воде на сегодня отсутствуют модельные представления о ее структуре. Общепринято, что водяной пар представляет собой смесь из отдельных молекул и неустойчивых небольших ассоциатов, которые можно рассматривать как совокупность динамических мезофаз. Свойства реального водяного пара [20], подобно свойствам льда и жидкой воды определяются силами, действующими между молекулами. Из-за неустойчивости ассоциатов и большой разреженности поведения пара достаточно точно описываются законами, действующими для газообразного состояния.

Анализ вышеприведенных сведений показывает, что даже эти наиболее новейшие работы не дают общепризнанных результатов, удовлетворительно описывающих все свойства фазовых разновидностей воды. Они противоречат друг другу и часто основаны на противоположных гипотезах. Отсюда следует, что применявшиеся до сих пор для изучения структуры жидкой воды и ее фазовых разновидностей теоретические и экспериментальные методы исследования не пригодны для полного и детального выяснения сложнейшей структуры воды. Следует также отметить, что ни одна из известных на сегодня моделей структуры воды не имеют достаточно научно-обоснованную теоретическую основу. Поэтому необходимость разработки новых подходов и методик исследований для более глубокого познания структуры воды является справедливым требованием времени.

Нами ранее было показано [21, 22], что наиболее новые, достаточно убедительные сведения о структуре воды удается получить на основе квантово-волновых представлений, и волновое уравнение де Броиля, справедливо и для молекулярных частиц типа отдельных молекул воды. В пределах линейного размера отдельной ферми-молекулы (диаметра) образуется стоячая волна.

Образование подобной стоячей волны обусловлено волновым процессом, вызванным движением электронов в рамках линейного размера водной молекулы. В общем случае такой волновой процесс осуществляется трехмерно и результирует пространственные эффекты. Важной характеристикой такого волнового процесса является то, что на границах водной молекулы из-за того, что электроны самостоятельно не смогут выйти за ее границы, амплитуда стоячей волны обращается в нуль и поэтому она способна лишь передавать энергию в водное окружение, создавая тем самым импульсное пространство. В силу этого отдельная водная молекула ведет себя подобно ферми-частице, которая в зависимости от уровня ее ферми-потенциала, передаваемого в окружающее пространство квантованно в виде энергии электромагнитного излучения, свое импульсное пространство заполняет свободными водными молекулами дискретно, и в общем случае может иметь одну и более координационных сфер. Такая водная структура формируется в зависимости от температуры в объеме всех разновидностей – твердой, жидкой и парообразной воды, имеет вполне определенную конфигурацию и геометрические размеры. Все структурные особенности воды являются прямым следствием взаимопревращений и динамических переходов, осуществляемых в системе, содержащей свободные единичные водные молекулы и связанные водные молекулы, которые включены в состав в водных ферми-поверхностей.

В настоящей работе приведены результаты исследований структурных особенностей всех фазовых разновидностей воды – твердой, жидкой и парообразной в интервале $T=0$ К до $T=546$ К. Установлено, что на структурные особенности воды определяющее влияние оказывает температурный фактор. Во всем температурном интервале от 0 К до 546 К ферми-потенциал водных ферми-поверхность образующих молекул возрастает, как уже было отмечено ранее [23-25], формируя в окружающем их пространстве, последовательный ряд вырожденно-стационарных состояний. В твердой воде водные ферми-молекулы в интервале температуре от 0 К до 273 К могут находиться в пределе в 9 вырожденно-стационарных состояниях и при этом тепловая энергия затрачивается целиком и полностью только на увеличение ферми-потенциала водных ферми-

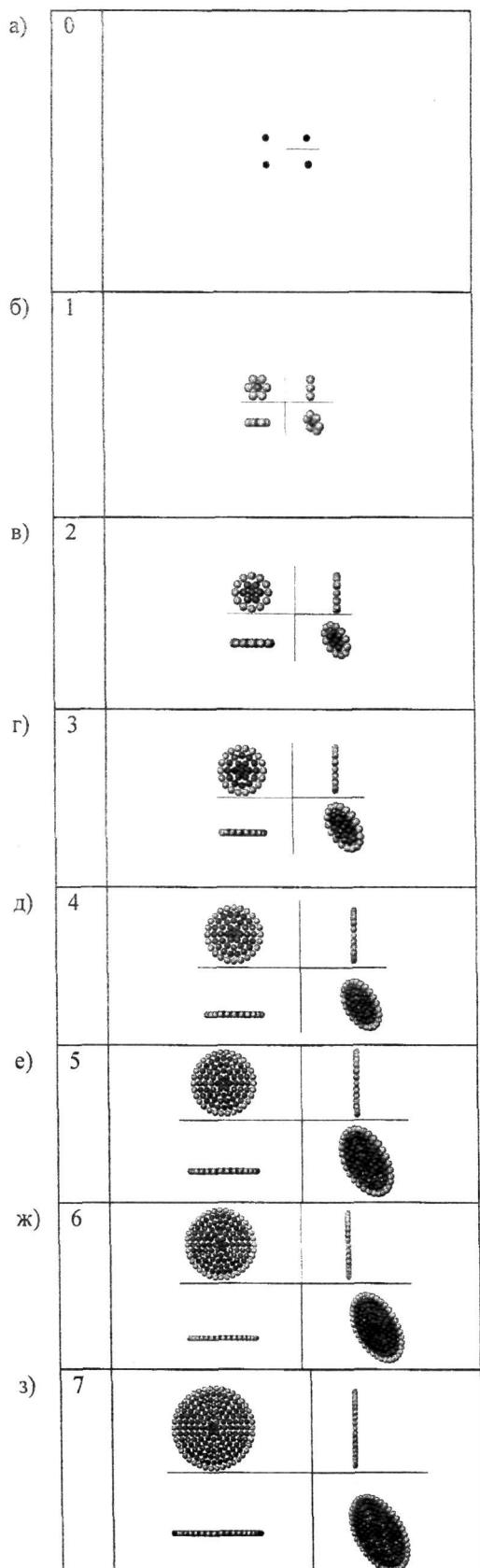


Рис. 1. Проекционные изображения и общий вид водных ферми-поверхностей твердой воды

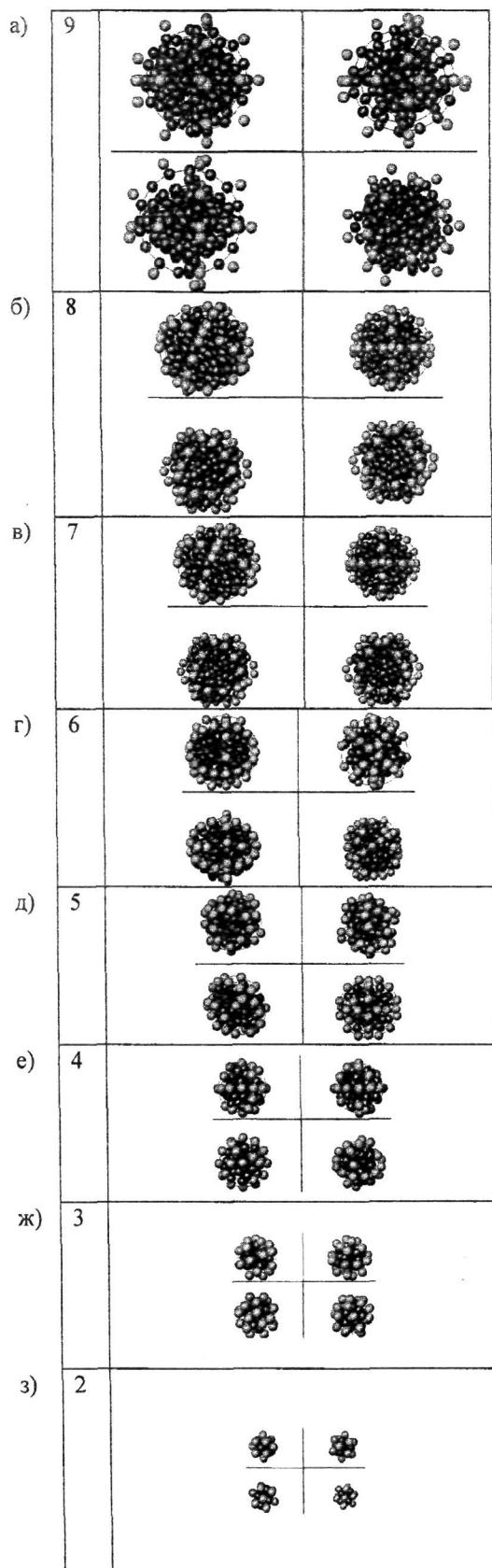


Рис. 2. Проекционные изображения и общий вид водных ферми-поверхностей жидкой и парообразной воды

поверхность образующих молекул и здесь формируется двухмерное импульсное пространство. Поэтому в данном случае водные ферми-поверхности в твердой воде имеют кольцевую конфигурацию и отличаются друг от друга в зависимости от температуры лишь диаметрами и количеством единичных водных молекул, включенных в их состав (рис. 1, а-к). На рис. 1 представлены все 9 разновидностей водных ферми-поверхностей, формирующихся в составе твердой воды, в трех проекциях и в общем виде.

В отличие от этого в жидкой и парообразной воде тепловая энергия уже не расходуется только на дальнейшее увеличение внутренней энергии отдельных ферми-молекул, а затрачивается также на увеличение кинетической энергии молекул воды, входящих в состав водных ферми-поверхностей. Поэтому рост температуры здесь приводит к последовательному снижению количества импульсных пространств, квантованно-дискретно заполненных единичными свободными водными молекулами. При этом в жидкой воде с ростом температуры от 273 К до 373 К будет наблюдаться снижение численности заполненных свободными молекулами воды 6 вырожденно-стационарных состояний или импульсных пространств в следующей последовательности $9 > 8 > 7 > 6 > 5 > 4$ и это результирует соответствующее уменьшение размеров водных ферми-поверхностей, а также общей численности, входящих в их состав единичных водных молекул (рис. 2, а-е). Здесь водные ферми-поверхности, в отличие от таковых в твердой воде, формируются в трехмерном импульсном пространстве и имеют сферическую форму.

В парообразной воде в интервале температур от 373 К до 546 К за счет дальнейшего увеличения кинетической энергии молекул воды, входящих в состав водных ферми-поверхностей, процесс последовательного снижения количества импульсных пространств, квантованно-дискретно заполненных единичными свободными водными молекулами, будет продолжаться. При этом в парообразной воде с ростом температуры от 373 до 546 К будет наблюдаться снижение численности заполненных свободными молекулами воды 3 вырожденно-стационарных состояний или импульсных пространств в следующей последовательности $3 > 2 > 1 > 0$ и это результирует соответствующее уменьшение размеров водных

ферми-поверхностей, а также общей численности, входящих в их состав единичных водных молекул (рис. 2, ж-к). Здесь водные ферми-поверхности, в отличие от таковых в твердой воде также имеют сферическую форму. В предельном случае при температуре 546 К рост температуры приводит к полному распаду всех водных ферми-поверхностей и образованию парообразной структурной формации воды, состоящей только лишь из одиночных свободных молекул воды.

Данные рис. 1, 2 свидетельствуют о том, что на основе квантово-волновых представлений удается установить структурные особенности возможных фазовых разновидностей воды. Всем агрегатно-фазовым модификациям воды свойственны характерные особенности типичных представителей квантовых конденсированных систем. Их структурные качественно-количественные показатели подчиняются закономерностям квантовой статистики. В этой связи, по нашему глубокому убеждению, вышеизложенные суждения и на их базе полученные результаты имеют важное научно-прикладное значение и могут быть приняты в качестве основополагающих положений новой квантово-волновой теории строения воды.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bernal J.D., Fowler R.H. A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions // J. Chem. Phys. 1933. V. 32, N 1. P. 237-256.
2. Бернал Дж., Фаулер Р. Структура воды и ионных растворов // Успехи физ. наук. 1934, №5. С. 14-27.
3. Бернал Дж.Д. Структура жидкости // Рост кристаллов. М.: Наука, 1965. Т. 5. С. 121-153.
4. Marchi R.P., Eyring H. Application of significant structure theory to water // J Phys. Chem. 1964. V. 68, N 2. P. 221-228.
5. Popl J.A. Molecular association in liquids. II. A theory of the structure of water // Proc. Roy. Soc Ser. A. 1951. V. 205, N 1081. P. 163-168.
6. Nemethy G., Cherge HA. Structure of water and hydrophobic bonding in proteins. I. A model for thermodynamic properties of liquid water // J. Chem. Phys. 1962. V. 36, N 12. P. 3385-3401.
7. Вдовенко В.М., Гуриков Ю.В., Ленин Е.К. Термодинамика двухструктурной модели воды // Журн. структур. химии. 1967. Т. 8, №1. С. 18-21.
8. Зацепина Г.Н. Физические свойства и структура воды. М.: МГУ, 1987. 171 с.
9. Weres O., Rice S. A. // J. Chem. Soc. 94. 8983 (1972).
10. Symons M.C.R. // Nature. 239. 257 (1972).
11. Саркисов Г.Н., Маленков Г.Г., Дащевский В.Г. Исследование структуры воды методом Монте-Карло // Журн. структур. химии. 1973. Т. 14, №1. С. 6-10.

12. Зенин С.В. Исследование структуры воды методом протонного магнитного резонанса // Доклады академии наук. 1993. Т. 332, №3. С. 328-329.
13. Зенин С.В. Структурированное состояние воды как основа управления поведением и безопасностью живых систем. Докторская диссертация. М.: РГБ, 2005. 207 с.
14. Наберухин Ю.И. К столетию статьи Рентгена о структуре воды // Журн. структур. химии. 1992. Т. 33, № 6. С. 5-7.
15. Бернал Дж.Д. Структура жидкости// Рост кристаллов. М.: Наука, 1965. Т. 5. С. 121-153.
16. Lonsdale D., Kathlon F. The structure of ice // Proc. Roy. Soc. 1958. V. 247. Ser A 247 № 1257. P. 424-434.
17. Meqaw H.D. Cell dimension of ordinary and heavy ice // Nature. 1934. V. 134. P. 900-919.
18. Bjerrum N. Structure and properties office // Science. 1952. V. 115, №2. P. 385-390.
19. Самойлов О.Я. Координационное число в структуре некоторых жидкостей // Журн. физ. химии. 1946. Т. 20, вып. 12. С. 1411-1414.
20. Ривкин С.Л., Александров А.А. Теплофизические свойства воды и водяного пара. М.: Энергия, 1980. 424 с.
21. Бестереков У.Б., Бишимбаев В.К. Основы квантово-статистических представлений строения объемной водной среды // Химия и химическая технология. 2004. Т. 47, вып. 9. Иваново. С. 46-50.
22. Бишимбаев В.К., Болысбек А.А., Евдокимова Е.Г., Ермеков С.Р., Камбарова Г.А. Квантово-волновое представление о структуре и свойствах водных систем // Материалы международной научно-практической конференции «Индустриально-инновационное развитие – основа устойчивой экономики Казахстана» 23-24 октября, 2006 г. 3 т. Шымкент. С. 487-489.
23. Евдокимова Е.Г., Бестереков У., Болысбек А.А., Бишимбаев В.К. Новейшие представления о структуре и свойствах водной среды обитания человечества // Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых. Ломоносов – 2007. Тезисы докладов, II Ч. Астана, 6-7 апреля, 2007 г. С. 206-207.
24. Евдокимова Е.Г., Бестереков У., Бишимбаев В.К. Структура водной среды в свете квантово-волновых представлений // «М. Ауэзов – Гений нового времени» МНПК. Шымкент-2007. С. 93-96.
25. Евдокимова Е.Г., Бестереков У., Бишимбаев В.К. О температурной зависимости физико-химических свойств водной структуры // Доклады НАН РК. 2008. №5. С. 13-18.

Резюме

Ғылыми жұмыста судың күйлік түрлемдерінің құрылышы туралы ілімдік және колданбалық манызы үлкен тың тұжырымдар келтірілген. Олар өзіндік ізденістер мен есептеулер нәтижесінде, судың құрылымы туралы кванттық-толқындық көзқарас тұрғысында және қазіргі кездегі судың құрылымы туралы жалпы танымдық мәліметтермен негізделген.

Summary

The new conclusions about structure of the phase varieties of water are brought in given article. They are received as a result of own studies and calculations, as well as on base of quantum-wave presentations and well-known positions about structure of water.

УДК 532.71.62-278

ЮКГУ им. М. Ауезова

Поступила 28.11.08г.