

(Южно-Казахстанский государственный университет им.М.Ауезова, Шымкент)

РАСЧЕТНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ ВОДЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ВОЛНОВОЙ ТЕОРИИ

Аннотация

Применительно ко всем фазовым разновидностям водной структуры с позиции новейшей квантово-волновой теории строения воды получены количественные сведения о структурных составляющих и некоторых параметрических и физико-химических показателях последней. Показано, что в интервале температуры от 0К до 546,15 К в водной структуре имеет место 18 полноценно завершенных структурных образований и одно переходное незавершенное структурное состояние, которое наблюдается при 273К и соответствует числу координационных слоев в водном ферми – комплексе, равному 8,53.

Ключевые слова: квантово-волновая теория, молекула Ферми, потенциал Ферми, свободная вода, водный Ферми-комплекс.

Тірек сөздер: квантты-толқынды теория, Ферми молекуласы, Ферми әлеуеті, бос су, сулы ферми-кешен.

Key words: quantum-wave theory, Fermi molecule, Fermi potential, free water, bound water, water Fermi-complex.

Структурные и свойственные особенности всеобщей известной воды и ныне являются объектом пристального внимания ученых и специалистов. Вода, несмотря на ее вездесущность и доступность, все еще остается загадкой. Исследования по данной тематике, преимущественно с использованием традиционных методов и подходов, проводятся в странах ближнего зарубежья в МГУ им. М.В. Ломоносова Зацепиной Г.Н., Шахпароновым М.И., в Новосибирском государственном университете Наберукиным Ю.И., в институте физической химии РАН Чураевым Н.В., в Санкт-Петербургском государственном университете Вуксом М.Ф., Полтарацким Г.М., в институте теоретической физики АН Украины Антонченко В.Я., в институте коллоидной химии и химии воды им. Думанского Овчаренко В.Д., Тарасевичем Ю.И., в институте технической теплофизики АН Украины Манком В.В., в научно-исследовательском институте традиционных методов лечения Зениным С.В. и другими. В странах дальнего зарубежья подобного рода исследования проводятся в США, Японии, Германии, Канаде, Англии, Франции. На сегодня создано большое множество теорий и положений о структуре воды и ее свойствах. Однако ни одна из них не позволяет полноценно раскрыть

причинно-следственные основы и суть большого разнообразия физико-химических, тепловых и иных особенностей воды [1-4].

Анализ современного состояния знаний по теории строения конденсированных фаз показывает, что в искомой области науки все еще достигнуты достаточно скромные результаты. На сегодня, как для теоретических исследований, так и для практических задач наибольшее значение имеет так называемая молекулярная теория явлений переноса в конденсированных системах, отличительная особенность, которой сводится к тому, что здесь связи структуры конденсированной фазы со свойствами ее структурных составляющих придаётся первостепенное значение. На основе достижений молекулярной теории сделан ряд существенной научной значимости обобщений и выводов. На сегодня не вызывают возражений суждения о том, что конденсированные системы могут быть подразделены на системы простые, сложные и квантовые. Как в простых, так и в сложных конденсированных системах тепловое движение их структурных составляющих и закономерности их распределения подчиняются законам классической механики и статистике нормального распределения Максвелла-Больцмана. В отличие от этого кинетические и энергетические характеристики структурных элементов квантовых жидкостей подчиняются закономерностям квантовой статистики Ферми-Дирака. В основе последних лежат новые научные положения о том, что любая совокупность материальных микро- или макрочастиц в условиях, когда их тепловая длина волны λ_T сравнима со средним расстоянием между ними, проявляет одновременно с корпускулярными также и волновые свойства. На сегодня принято считать, что квантовые жидкости – одна из широко распространенных форм существования материи во вселенной [5,6].

Квантово-волновые представления, закономерности квантовой статистики на сегодня в мировой практике для описания свойств и структуры воды все еще не находят должного применения. По нашему мнению, предложенная нами сравнительно недавно [7,8] квантово-волновая теория строения водных структур позволит раскрыть все еще неизвестные закономерности конденсированного состояния веществ, установить научно-обоснованные причинно-следственные основы многообразий нормальных и аномальных поведений воды. Это, вне сомнения, способствует невиданному прорыву и прогрессу в областях науки, техники и технологии, непосредственно связанных с водными процессами.

В качестве объектов исследования выбраны все фазовые разновидности воды, свойства которых достаточно хорошо изучены экспериментально [1-3,9-13]. Результаты теоретических исследований получены на базе принципиальных положений новой структурной модели воды, которая от известных на сегодня отличается тем, что в основе ее использованы современные представления о квантово-волновой сущности материальных частиц. При этом водная среда рассматривается как гомогенная система, состоящая из двух составных частей – свободных молекул воды и связанных водных ферми-комплексов. В объеме водной среды между ее составными частями в установившемся режиме поддерживается динамическое равновесие. Равновесное состояние водной среды может быть нарушено в результате воздействия температуры. Результаты вычислительных экспериментов показали, что сдвиг равновесия в водной среде сопровождается формированием водных ферми-комплексов или их деструкцией – распадом. В основе вычислительных экспериментов использованы как общеизвестные,

так и новые расчетные выражения [14,15], полученные впервые на базе общепризнанных фундаментальных закономерностей выдающихся ученых - физиков Ландау и Лифшиц, установленных [6] применительно к особому типу конденсированного состояния веществ - квантовых жидкостей.

Как было показано нами ранее [7,8,14,15], наиболее новые и достаточно убедительные сведения о структуре и свойствах воды удается получить на основе квантово-волновых представлений. Установлено, что волновое уравнение де Бройля справедливо и для молекулярных частиц типа отдельных молекул воды. В пределах линейного размера отдельной водной ферми-молекулы образуется стоячая волна, длина которой такова, что на протяжении диаметра водной молекулы укладывается целое число полуволн ($n_{1/2}$). 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 трехмерного волнового процесса является то, что на внешних границах линейного размера водной молекулы амплитуда стоячей волны обращается в нуль. Такая стоячая волна не перемещается в пространстве, она способна лишь передавать энергию в водное окружение, создавая тем самым здесь 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 может быть названа водным ферми-комплексом и формируется в зависимости от температуры в объеме всех разновидностей - твердой, жидкой и парообразной воды, имеет вполне определенную конфигурацию и геометрические размеры. Все структурные и свойственные особенности воды являются прямым следствием взаимопревращений и динамических переходов, осуществляемых в системе, содержащей свободные водные молекулы и связанные водные ферми-комплексы.

В таблице приведены результаты теоретических исследований состава структурных составляющих и некоторых параметрических и физико-химических показателей водной наноструктуры в интервале $T=0$ К до $T=546,15$ К в расчете на один моль.

Данные таблицы свидетельствуют о том, что на основе квантово-волновых представлений удастся установить основные структурно - параметрические характеристики водной наноструктуры и на их основе вычислить расчетным путем физико-химические показатели всех ее фазово - составных разновидностей.

Таблица 1 – Структурно-параметрические характеристики и физико-химические показатели водной наноструктуры

Т, К	Число свободн ых молеку л	Факто р упако вки компл	Плотн ость свобод ных молеку	Плотн ость компле к-сов,	Общ ая плот- ность ,	Общий удельн ый объем, см ³ /мо	Удельн ый объем свобод ных	Удельн ый объем компле к-сов,	Удельн ый объем свобод ных
------	---------------------------------------	-------------------------------------	--	-----------------------------------	----------------------------------	--	--	---	--

		ЕК-СОВ	л, г/см ³	г/см ³	г/см ³	лб	молеку л, см ³ /мол б	см ³ /мо лб	пустот, см ³ /мол б
0	6,00E+2 3	0,0000 00	5,38E- 01	1,90E- 03	0,539 46	33,357 858	2,25476 8	0,00E+ 00	3,11E+0 1
3,76	5,87E+2 3	0,1064 36	5,42E- 01	1,37E- 02	0,556 19	32,354 465	2,20687 9	3,44E+ 00	2,67E+0 1
14,3	5,62E+2 3	0,1829 75	5,46E- 01	3,92E- 02	0,585 46	30,736 908	2,11110 1	5,62E+ 00	2,30E+0 1
32,1 8	5,24E+2 3	0,2311 98	5,38E- 01	8,08E- 02	0,619 28	29,058 31	1,96743 3	6,72E+ 00	2,04E+0 1
57,2 1	4,73E+2 3	0,2954 65	5,25E- 01	1,44E- 01	0,668 79	26,907 146	1,77587 7	7,95E+ 00	1,72E+0 1
89,3 9	4,09E+2 3	0,3602 20	4,99E- 01	2,36E- 01	0,735 03	24,482 307	1,53643 1	8,82E+ 00	1,41E+0 1
128, 72	3,32E+2 3	0,4231 36	4,51E- 01	3,66E- 01	0,816 45	22,040 823	1,24909 6	9,33E+ 00	1,15E+0 1
175, 21	2,43E+2 3	0,4758 95	3,65E- 01	5,39E- 01	0,904 49	19,895 444	0,91387 2	9,47E+ 00	9,51E+0 0
228, 54	1,41E+2 3	0,5017 11	2,29E- 01	7,48E- 01	0,977 18	18,415 471	0,53075 9	9,24E+ 00	8,65E+0 0
273	8,60E+2 2	0,4383 24	1,43E- 01	8,57E- 01	0,999 87	17,997 57	0,32324	7,89E+ 00	9,79E+0 0
274, 95	1,41E+2 3	0,4314 55	2,35E- 01	7,65E- 01	0,999 93	17,996 49	0,53075 9	7,76E+ 00	9,70E+0 0
283, 8	2,43E+2 3	0,4098 28	4,04E- 01	5,96E- 01	0,999 63	18,001 891	0,91387 2	7,38E+ 00	9,71E+0 0
299, 8	3,32E+2 3	0,3898 87	5,50E- 01	4,46E- 01	0,996 59	18,056 804	1,24909 6	7,04E+ 00	9,77E+0 0
322, 96	4,09E+2 3	0,3680 03	6,71E- 01	3,17E- 01	0,988 09	18,212 137	1,53643 1	6,70E+ 00	9,97E+0 0
353, 26	4,73E+2 3	0,3411 87	7,63E- 01	2,09E- 01	0,971 66	18,520 089	1,77587 7	6,32E+ 00	1,04E+0 1
390, 72	5,24E+2 3	0,3088 91	8,22E- 01	1,23E- 01	0,945 13	19,039 952	1,96743 3	5,88E+ 00	1,12E+0 1

435, 33	5,62E+2 3	0,2730 74	8,44E- 01	6,07E- 02	0,905 12	19,881 596	2,11110 1	5,43E+ 00	1,23E+0 1
487, 09	5,87E+2 3	0,2242 14	8,24E- 01	2,09E- 02	0,844 68	21,304 198	2,20687 9	4,78E+ 00	1,43E+0 1
546, 15	6,00E+2 3	0,0000 00	7,59E- 01	2,69E- 03	0,761 2	23,640 607	2,25476 8	0,00E+ 00	2,14E+0 1

Результаты расчетов показывают, что всем агрегатно-фазовым модификациям воды свойственны характерные особенности типичных представителей квантовых конденсированных систем. Закономерности изменения их параметрических характеристик и физико-химических показателей подчиняются общепризнанным на сегодня теоретическим положениям квантовой статистики.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Эрдей-Груз. Т. Явление переноса в водных растворах. - М.: Мир, 1976. – 595 с.
- 2 Зацепина Г.Н. Физические свойства и структура воды. - М.: МГУ, 1987. – 171 с.
- 3 Антонченко В.Я., Давыдов А.С., Ильин В.В. Основы физики воды. – Киев: Наукова думка, 1991. – 672.
- 4 Зенин С.В. Структурированное состояние воды как основа управления поведением и безопасностью живых систем. Докторская диссертация. М.: РГБ, 2005 г. -207 с.
- 5 Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. - М.: Мир, 1967. – 432 с.
- 6 Шахпаронов М.И. Введение в современную теорию растворов. - М.: Высшая школа, 1976. – 296 с.
- 7 Бестереков У.Б., Бишимбаев В.К. Основы квантово-статистических представлений строения объемной водной среды //Химия и химическая технология. – 2004. Т. 47, В 9. Иваново. - С. 46-50.
- 8 Бишимбаев В.К., Болысбек А.А., Евдокимова Е.Г., Ермеков С.Р.Г.А.Камбарова. 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 том. Шымкент. С. 487-489.
- 9 Краткий справочник химика. Под ред. В.И. Перельман, Москва-Ленинград, Химия, 1964, 624 стр.
- 10 Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой, Ленинград: Химия, 1983, 232 стр.

- 11 Вода // Справочник химика. – М.: Химия, т.5, 1966. – С. 17-23.
- 12 Маэно Н. Наука о льде /Н. Маэно.; Пер. с японского – М.: Мир, 1988. – 271 с.
- 13 Теплофизические свойства воды и водяного пара. Ривкин С.Л., Александров А.А. - М.: Энергия, 1980. -424 стр.
- 14 Бестереков У. Основы теории пленочной модели механизма мембранного разделения водных смесей и ее эколого-технологические аспекты. Док, дисс. Шымкент. 2006, С.312.
- 15 Евдокимова Е.Г. Модель структуры, свойства и технология нанодифракционирования воды. Канд. дисс. Шымкент. 2009, С.132.

REFERENCES

1. Erdey-Gruz T. Iavlenie perenosa v vodnykh rastvorax. Moscow, Mir, **1976**, 595.
2. Zatsepina G.N. Fizicheskaya svoistva I structura vody. Physical properties and structure of water. Moscow, MGU **1987**, 171.
3. Antonchenko V.Y., Davydov A.S., Ilyin V.V. Osnovy fiziki vody. Kiev, Naukovadumka, **1991**, 672.
4. Zenin S.V. Doctoral thesis. Moscow, RGB, **2005**, 207.
5. Pains D., Nozier F. Teoya kvantovykh zhidkostei, Mir, **1967**, 432.
6. Shahparonov M.I. Vvedenie v sovremennuiu teoriyu rastvorov.. Moscow, Vysshayashkola, **1976**. 296.
7. Besterekov U.B., Bishimbayev V.K. Himia i himicheskaya tehnologia, **2004**, 47, 9, 46-50.
8. Bishimbayev V.K., Bolysbek A.A., Evdokimova E.G., Ermekov S.R., Kambarova G.A. Materialy Mezhdunarodnoi konf. Shymkent, **2006**, 3, 487-489.
9. Kratki spravochnik himika. Pod red. V.I.Perelmann. Moscow, Leningrad, Himia, **1964**, 624.
10. kratki spravochnik fizika-himicheskikh velichin. Pod red. A.A.Ravdel i A.M.Ponomareva. Leningrad, Himia, **1983**, 232.
11. Voda. Spravochnik himika. Moscow, Himia, **1966**, 5, 17-23.
12. Maeno N. Nauka o lde. Pod red. N.Maeno. Per.s yaponskogo. Moscow, Mir, **1988**, 271.
13. Rivkin S.L., Aleksandrov A.A. Termofizicheskie svoistva vody i vodinogo para. Moscow, Energiya, **1980**, 424.
14. Besterekov U. Doctoral thesis. Shymkent, **2006**, 312.

15. Evdokimova E.G.. Candidate's dissertation. Shymkent, **2009**, 132.

Ү.Бестереков, А.А.Болысбек, Ұ.Б.Назарбек

(М.Ауезов Атындағы Оңтүстік Қазақстан Мемлекеттік университеті, Шымкент қ.)

КВАНТТЫ-ТОЛҚЫНДЫ ТЕОРИЯСЫНЫҢ НЕГІЗІНДЕ АЛЫНҒАН СУ ҚҰРЫЛЫМЫН ЗЕРТТЕУДІҢ ЕСЕПТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІ

Резюме

Су құрылысының жаңа квантты-толқынды теориясы тұрғысынан су құрылысының барлық түріне қолдануға болатын судың бірқатар параметрлі және физика-химиялық көрсеткіштері және құрылымдық құраушылар туралы сандық мәліметтер алынған. 0 К-нен 546,15К-ге дейінгі температура аралығында су құрылымында 18 толық аяқталған құрылымдық түзілімдер және 273 К кезінде байқалатын бір аяқталмаған құрылымдық күй орын алады және 8,53-ке тең болатын сулы ферми-кешенде координациялық қабаттар санына сәйкес келеді.

Тірек сөздер: квантты-толқынды теория, Ферми молекуласы, Ферми әлеуеті, бос су, сулы ферми-кешен.

U.Besterekov, A.A.Bolysbek, U.B.Nazarbek

(M.Auezov South-Kazakhstan State University, Shymkent)

CALCULATION RESULTS OF RESEARCH OF WATER STRUCTURE, OBTAINED ON THE BASIS OF THE QUANTUM-WAVE OF THEORY

Summary

Concerning all the phase varieties of water structure from the position of the modern quantum-wave theory of water structure the quantitative data on structural components and some

parametrical and physicochemical parameters of the latter have been obtained. It is proved, that in the temperature interval between 0 K and 546,15 K in water structure take place 18 full-rate and completed structural formations and one transient uncompleted structural condition which is observed at 273 K and corresponds to the number of coordinating layers in water of Fermi complex, equal to 8,53.

Key words: quantum-wave theory, Fermi molecule, Fermi potential, free water, bound water, water Fermi-complex.

Поступила 02.10.2013 г.