

Е. Г. ЕВДОКИМОВА, В. К. БИШИМБАЕВ, У. БЕСТЕРЕКОВ

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ОСНОВНЫХ СТРУКТУРНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДЫ

Приведены новые заключения о температурной зависимости основных структурных показателей и термодинамических характеристик воды. Они получены в результате собственных исследований и расчетов, а также на основе квантово-волновых представлений и общепризнанных положений о структуре и основных термодинамических свойствах воды.

Структурные и свойственные особенности воды и ныне продолжают оставаться объектами пристального внимания ученых и специалистов. Вода, как одна из разновидностей конденсированного состояния веществ, несмотря на ее вседесущность и доступность, все еще является загадкой. Создано большое множество теорий и положений о структуре воды и ее свойствах. Однако не одна из них не позволяет полноценно раскрыть причинно-следственные основы и суть большого разнообразия структурных, тепловых, термодинамических и иных особенностей воды [1, 2].

Анализ современного состояния знаний по теории строения конденсированных фаз показы-

вает, что в искомой области науки достигнуты достаточно скромные результаты [3]. Вместе с тем, на основе достижений молекулярной теории жидкости сделан ряд существенной научной значимости обобщений и выводов. В частности, более не вызывают возражений нижеследующие положения. Конденсированные системы могут быть подразделены на простые, сложные и квантовые. При этом под простыми приняты жидкие системы, состоящие из сферической формы многоатомных молекул. Как в простых, так и в сложных конденсированных фазах тепловое движение их структурных составляющих и закономерности их распределения подчиняются соответственно законам классической механики и статистике

нормального распределения Максвелла-Больцмана, т.е. состояние любого структурного элемента жидкой системы однозначно определяется его пространственными координатами и составляющими импульсом. Как координаты структурных элементов жидкой системы, так и импульсы могут меняться непрерывно. Поэтому для любой структурной частицы жидкости возможны различные состояния, бесконечно мало отличающиеся друг от друга координатами, импульсами и энергиями. В основе всего этого лежит то, что структурным элементам простых и сложных жидких систем, представляемым однородными атомами или многоатомными частицами, характерны так называемые молекулярные свойства. Как известно, любая совокупность материальных микро- или макрочастиц в условиях, когда тепловая длина волн λ_T сравнима со средним расстоянием между ними, проявляет также волновые свойства, для оценки которых применимы закономерности квантовой статистики. Подобные жидкие системы, кинетические и энергетические характеристики структурных элементов которых подчиняются закономерностям квантовой статистики Ферми-Дирака, получили название квантовых жидкостей. Принято считать, что квантовые жидкости – одна из широко распространенных форм существования материи во вселенной.

Согласно современным взглядам, квантовые жидкости являются очень важным разделом теории конденсированных систем. Однако на сегодня они в общедоступной научной литературе мало освещены. Значительная часть известных сведений отражает лишь общую теоретическую основу квантовых жидкостей и их приложение применительно к изучению свойств и строений атомарных простых квантовых жидкостей типа жидких ^4He и ^3He . Относительно молекулярных конденсированных систем, в том числе и водных, на данном этапе квантотехнические представления не разработаны.

Исследования по данной тематике в республике Казахстан проводятся лишь в Южно-Казахстанском государственном университете имени М.Ауэзова. В странах ближнего зарубежья исследования свойств, структуры воды, а также различных жидкостей, однако преимущественно с использованием традиционных методов и подходов, плодотворно занимаются в МГУ им.

М.В. Ломоносова Зацепина Г.Н., Шахпаронов М.И., в Новосибирском государственном университете Наберухин Ю.И., в институте физической химии РАН Чураев Н.В., в Санкт-Петербургском государственном университете Вукс М.Ф., Полтарацкий Г.М., в институте теоретической физики АН Украины Антонченко В.Я., в институте коллоидной химии и химии воды им. Думанского Овчаренко В.Д., Тарасевич Ю.И., в институте технической теплофизики АН Украины Манк В.В., в научно-исследовательском институте традиционных методов лечения Зенин С.В. [4] и другие. В странах дальнего зарубежья подобного рода исследования проводятся в США, Японии, Германии, Канаде, Англии, Франции.

Кvantово-волновые представления, закономерности квантовой статистики на сегодня в мировой практике для описания свойств, структуры воды и водных смесей все еще не применены. Создание квантово-волновой теории строения водных систем позволит раскрыть все еще неизвестные закономерности конденсированного состояния веществ, установит научно-обоснованные причинно-следственные основы многообразия нормальных и аномальных поведений воды. Это, вне сомнения, способствует невиданному прорыву и прогрессу в науке, технике, технологии и даст человечеству возможность полностью удовлетворить все потребности сегодня, завтра и в далекой перспективе. Установление закономерностей строения воды, причинно-следственных основ ее нормальных и аномальных поведений способствует также максимальной оптимизации, интенсификации и экологизации водно-технологических традиционных процессов, эффективность которых зачастую не отвечает требованиям времени.

Как было показано нами ранее [5, 6], наиболее новые и достаточно убедительные сведения о структуре и свойствах воды удается получить на основе квантово-волновых представлений. Установлено, что волновое уравнение де Броиля, справедливо и для молекулярных частиц типа отдельных молекул воды. В пределах линейного размера отдельной ферми-молекулы (диаметра) образуется стоячая волна, длина которой такова, что на протяжении диаметра ее укладывается целое число полуволн ($n_{1/2}$). Образование подобной стоячей волны обусловлено волновым процессом, вызванным движением электронов

Таблица 1. Основные структурные показатели водной наноструктуры

T, K	Число свободных молекул	Число связанных в комплексы молекул	Общее число молекул	Число комплексов	Число координационных слоев	Число внешних молекул в комплексе	Общее число молекул в одном комплексе	Общий фактор упаковки	Диаметр одного комплекса, см	Поверхность свободных молекул, см ²	Поверхность комплексов, см ²	Общая поверхность, см ²
0	6,00E+23	2,12E+21	6,02E+23	2,12E+21	0	0	1	0,067593	0,00E+00	7,01E+08	0,00E+00	7,01E+08
3,76	5,87E+23	1,49E+22	6,02E+23	2,12E+21	1	6	7	0,174645	1,46E-07	6,86E+08	1,42E+08	8,28E+08
14,3	5,62E+23	4,04E+22	6,02E+23	2,12E+21	2	12	19	0,251658	1,72E-07	6,56E+08	1,97E+08	8,53E+08
32,18	5,24E+23	7,86E+22	6,02E+23	2,12E+21	3	18	37	0,298904	1,82E-07	6,12E+08	2,21E+08	8,33E+08
57,21	4,73E+23	1,30E+23	6,02E+23	2,12E+21	4	24	61	0,361465	1,93E-07	5,52E+08	2,48E+08	8,00E+08
89,39	4,09E+23	1,93E+23	6,02E+23	2,12E+21	5	30	91	0,422977	1,99E-07	4,78E+08	2,65E+08	7,43E+08
128,72	3,32E+23	2,70E+23	6,02E+23	2,12E+21	6	36	127	0,479808	2,03E-07	3,88E+08	2,75E+08	6,64E+08
175,21	2,43E+23	3,59E+23	6,02E+23	2,12E+21	7	42	169	0,521828	2,04E-07	2,84E+08	2,78E+08	5,62E+08
228,54	1,41E+23	4,61E+23	6,02E+23	2,12E+21	8	48	217	0,530533	2,03E-07	1,65E+08	2,74E+08	4,39E+08
273	8,60E+22	5,16E+23	6,02E+23	2,12E+21	8,53	26	243	0,456284	1,92E-07	1,01E+08	2,46E+08	3,47E+08
274,95	1,41E+23	4,61E+23	6,02E+23	2,12E+21	8	48	217	0,460947	1,91E-07	1,65E+08	2,44E+08	4,09E+08
283,8	2,43E+23	3,59E+23	6,02E+23	2,12E+21	7	42	169	0,460593	1,88E-07	2,84E+08	2,36E+08	5,20E+08
299,8	3,32E+23	2,70E+23	6,02E+23	2,12E+21	6	36	127	0,459063	1,85E-07	3,88E+08	2,28E+08	6,17E+08
322,96	4,09E+23	1,93E+23	6,02E+23	2,12E+21	5	30	91	0,452366	1,82E-07	4,78E+08	2,21E+08	6,99E+08
353,26	4,73E+23	1,30E+23	6,02E+23	2,12E+21	4	24	61	0,437076	1,78E-07	5,52E+08	2,12E+08	7,65E+08
390,72	5,24E+23	7,86E+22	6,02E+23	2,12E+21	3	18	37	0,412223	1,74E-07	6,12E+08	2,03E+08	8,14E+08
435,33	5,62E+23	4,04E+22	6,02E+23	2,12E+21	2	12	19	0,379257	1,70E-07	6,56E+08	1,92E+08	8,48E+08
487,09	5,87E+23	1,49E+22	6,02E+23	2,12E+21	1	6	7	0,327803	1,63E-07	6,86E+08	1,76E+08	8,62E+08
546,15	6,00E+23	2,12E+21	6,02E+23	2,12E+21	0	0	1	0,095377	0,00E+00	7,01E+08	0,00E+00	7,01E+08

Таблица 2. Основные термодинамические показатели водной наноструктуры

T, K	Общая теплоемкость, Дж/моль*К	Теплоемкость свободных молекул, Дж/моль*К	Теплоемкость комплексов, Дж/моль*К	Общая энталпия, Дж/моль*	Энталпия свободных молекул, Дж/моль*	Общая энтропия, Дж/моль*	Энтропия свободных молекул, Дж/моль*	Общая энергия Гиббса комплексов, Дж/моль	Энергия Гиббса свободных молекул, Дж/моль*	Энергия Гиббса комплексов, Дж/моль*К
128,72	2823,167	1558,461	1264,706	-232072	-128110	-103962	435,8069	2,41E+02	195,2302	-288169
175,21	1537,348	620,8993	916,4487	-258881	-104556	-154325	203,6027	8,22E+01	121,3723	-294554
228,54	919,1446	215,5981	703,5466	-280231	-65732,2	-214499	85,78335	2,01E+01	65,66168	-299836
273	657,8192	93,97115	563,848	-291850	-41691,5	-250158	39,33	5,62E+00	33,71161	-302587
273	76,017	10,85922	65,15778	-285830	-40831,5	-244998	69,94945	9,99E+00	59,95699	-304926
274,95	75,93925	17,8126	58,12665	-285827	-67044,8	-218783	69,94066	1,64E+01	53,53512	-71555,5
283,8	75,64458	30,5511	45,09348	-285825	-115438	-170387	69,9325	2,82E+01	41,68838	-305672
299,8	75,32555	41,58165	33,7439	-285828	-157785	-128044	69,94493	3,86E+01	31,33352	-306798
322,96	75,2574	51,10058	24,15683	-285843	-194091	-91752,6	69,98913	4,75E+01	22,46577	-308447
353,26	75,69377	59,40684	16,28693	-285840	-224336	-61503,9	69,97847	5,49E+01	15,05718	-310561
373	76,21743	63,3704	12,84704	-285830	-237651	-48178,9	69,95	5,82E+01	11,79061	-311921
373	34,23202	28,46195	5,770072	-241843	-201078	-40764,5	188,7278	1,57E+02	31,81154	-312238
390,72	34,40077	29,91106	4,48972	-241859	-210294	-31565,6	188,7671	1,64E+02	24,6364	-315615
435,33	34,83652	32,50178	2,334735	-241867	-225657	-16209,9	188,7783	1,76E+02	12,65188	-324048
487,09	35,35582	34,48284	0,872988	-241876	-235903	-5972,27	188,7891	1,84E+02	4,661485	-333833
546,15	35,9599	35,9599	0	-261479	-261479	0	188,72	1,89E+02	0	-364549
										0

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 границах водной молекулы из-за того, что электроны самостоятельно не смогут выйти за ее границы, амплитуда стоячей волны обращается в нуль. Известно, что такая стоячая волна не перемещается в пространстве, 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 может быть названа воднойnanoструктурой или водной ферми-поверхностью 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 молекулы.

В настоящей работе приведены результаты исследований структурных особенностей и характеров изменений основных термодинамических показателей водной nanoструктуры в интервале $T=0$ К до $T=546$ К в расчете на один моль (табл. 1, 2).

Данные табл. 1, 2 свидетельствуют о том, что на основе квантово-волновых представлений удаётся установить основные показатели водной nanoструктуры и на их основе вычислить расчетным путем физико-химические и термодинамические характеристики всех разновидностей водной структуры. Отсюда следует, что всем агрегатно-фазовым модификациям воды свойствен-

ны характерные особенности типичных представителей квантовых конденсированных систем. Их физико-химические и термодинамические показателей подчиняются закономерностям квантовой статистики. В этой связи, по нашему убеждению, вышеизложенные суждения и на их базе полученные результаты имеют важное научно-прикладное значение и могут быть приняты в качестве основ квантово-волновой теории строения водной nanoструктуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зацепина Г.Н. Физические свойства и структура воды. М.: МГУ, 1987. 171 с.
2. Антонченко В.Я., Давыдов А.С., Ильин В.В. Основы физики воды. Киев: Наукова думка, 1991. 672 с.
3. Шахпаронов М.И. Введение в современную теорию растворов. М.: Высшая школа, 1976. 296 с.
4. Зенин С.В. Структурированное состояние воды как основа управления поведением и безопасностью живых систем. Докторская диссертация. М.: РГБ, 2005. 207 с.
5. 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.
6. В.К.Бишимбаев А.А.Болысбек Е.Г.Евдокимова С.Р. Ермеков 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.

Резюме

Судын негізгі құрылымдық көрсеткіштері мен термодинамикалық сипаттамаларының температуралы тәуелділігі туралы ілімдік және қолданбалық манзызы үлкен тын тұжырымдар келтірілген. Олар өзіндік ізденістер мен есептеулер нәтижесінде, судын құрылымы туралы кванттық-толқындық қозқарас тұрғысында және қазіргі кездегі судын құрылымы мен негізгі термодинамикалық қасиеттері туралы жалпы танымдық мәліметтермен негізделген.

Summary

The new conclusions about temperature dependence of main structured factors and thermodynamic characteristics 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 and main thermodynamic characteristics of water.

ЮКГУ им. М. Ауэзова,
г. Шымкент, Казахстан

Поступила 10.09.08г.