



Original Article: PROCESSI E FENOMENI INSOLITI IN ACQUA E LA LORO GIUSTIFICAZIONE FISICA

Citation

Abdullaev A.A., Rabadanov G.A. Processi e fenomeni insoliti in acqua e la loro giustificazione fisica. *Italian Science Review*. 2014; 10(19). PP. 145-150.
Available at URL: <http://www.ias-journal.org/archive/2014/october/Abdullaev.pdf>

Authors

A.A. Abdullaev, Institute for Geothermal Research Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences, Russia.
G.A. Rabadanov, Institute for Geothermal Research Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences, Russia.

Submitted: September 20, 2014; Accepted: September 27, 2014; Published: October 9, 2014

In questo articolo analizziamo le condizioni per la creazione e formati nel territorio della compressa strutture molecolari di acqua liquida di varie dimensioni e forme.

Identificazione e registrazione delle loro condizioni di esistenza stabile di acqua allo stato liquido, a nostro avviso consentiranno di regolare le proprietà dell'acqua e migliorare le caratteristiche tecnologiche del loro utilizzo. Per la formazione della struttura molecolare in acqua liquida deve essere usato nei legami tra atomi di molecole diverse [1,2], e non tra le molecole come è stato fatto e cercando di fare finora. La formazione di legami tra gli atomi di molecole diverse promuove i protoni attività donatore-accettore (PADA) molecole di H₂O. È ben noto [3] che la molecola H₂O è un donatore e accettore di protoni simmetrica doppia simultaneamente.

Quando contabilità molecole di H₂O PADA interazione interatomico di diverse molecole includono sforzo a trazione delle orbite chiuse degli elettroni di valenza degli atomi di idrogeno di molecole di H₂O senza interrompere la chiusura delle loro orbite ed

esegue nuclei schermatura tempo (protoni) di atomi di idrogeno. A volte, la schermatura i protoni sono in grado di passare le coppie di elettroni solitari dell'atomo di ossigeno della molecola vicina e formare un legame idrogeno con lei (H-bond).

Lo schema sopra per la formazione del legame idrogeno che richiede una base fisica ed è uno degli obiettivi del lavoro svolto.

Da tempo è stato osservato [2], che è una forte influenza sulla molecola dai suoi vicini porta a gruppi associati di molecole in regioni locali di acqua liquida.

Va sottolineato, tuttavia, senza la presenza di orientamento e localizzata nello spazio costringe la formazione di strutture molecolari in acqua liquida non è possibile [2].

Alcuni generalizzazione dei concetti di gruppi legati di molecole è l'idea di una interazione risonante (IR) atomi di molecole diverse con il parametro adimensionale α [2,3].

Ora dimostrato che l'idea di IR atomi di molecole diverse permettono di costruire l'associazione locale di molecole di diverse

dimensioni e forme [4,5]. La consapevolezza di convenienza prima che l'effetto di fattori esterni sul sistema acqua attraverso il legame idrogeno tra le molecole portato alla comprensione del ruolo dei legami idrogeno nella creazione di strutture molecolari.

In questo lavoro, come punto di partenza le dinamiche di H-bond e la formazione di strutture molecolari utilizzati Roulettes atomi di molecole diverse con il parametro adimensionale α .

Nei lavori [4,5] hanno dimostrato che IR atomi di molecole diverse in secondo ordine nel parametro α possono essere considerati come l'interazione di dispersione degli atomi (molecole).

Negli ultimi anni, è ben stabilito [6] che la presenza di legami idrogeno nello spettro vibrazionale di molecole di H₂O porta ad uno $\Delta\omega$ spostamento di frequenza che è proporzionale all'energia ε_n di legame idrogeno. In studi [5,7] hanno dimostrato che l'energia del legame idrogeno può essere rappresentato come:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_o \alpha(1 - \alpha) \quad (1)$$

dove ε_n - una costante con dimensioni di energia.

Durante la formazione di legami idrogeno, a differenza del legame chimico viene rilasciato, non tutta l'energia attesa: parte di questa energia viene memorizzato nella struttura risultante in forma di energia configurazionale. Pertanto, è chiaro che l'eccesso di energia degli atomi di molecole diverse pb associato alla configurazione e permette all'energia di modificare la struttura molecolare della struttura spaziale.

Atomi Studio IR diverse molecole hanno mostrato [5,7] parametro α , generando una compressione locale in acqua può essere considerata come un fattore di riduzione del polarizzabilità delle molecole α_{II} . Infatti, gli spostamenti protoni presenti nelle molecole nella formazione di legami idrogeno sono responsabili di cambiamenti nella polarizzabilità molecolare e l'aspetto della deformazione della carica Q_d nella H-bond. A causa del fatto che, per un valore

fisso dei valori dei parametri α delle grandezze Q_d devono cambiare in concerto rapporto tra i parametri α_{II} e Q_d può essere

$$\text{rappresentato come: } \alpha = \alpha_{II} + \frac{1}{e_o} Q_d \quad (2)$$

Dove e_o - l'unità universale della carica elettrica, e la carica di deformazione Q_d è una uguaglianza: $Q_d = e_o(2\alpha - 1)$ (3)

A nostro avviso, la situazione più interessanti si pone in acqua in una regione locale di raggio $R = 10^{-6}$ M, quando gli atomi eccesso IR energia di molecole diverse, ε_n vale a dire coincide con l'energia di interazione di deformazione dei carichi di griglia H-bond, ossia con il valore di $\varepsilon_e = \varepsilon_o(2\alpha - 1)^2$.

Al punto di coincidenza di valori, ε_n , ε_e abbiamo l'uguaglianza $\alpha(1 - \alpha) = (2\alpha - 1)^2$ (4)

L'equazione (4), dopo le azioni elementari può essere rappresentato come:

$$\alpha^2 - \alpha + \frac{1}{5} = 0 \quad (5)$$

fisicamente radice soddisfacente l'equazione (5) è determinato dal valore $\varepsilon_e = 0,723$.

Dopo aver utilizzato il parametro in funzione della temperatura [7], si ottiene:

$$T_e = 43 \text{ }^\circ\text{C} \quad (6)$$

Quelli parametro è direttamente correlata al vecchio problema ancora irrisolto della determinazione della temperatura di occorrenza nella regione locale di raggio $R = 10^{-6}$ M transizioni sincrone di protoni (TSP), che sono stati noti [8] tempo fa.

Così, quando $T > T_e$ griglia è ricco-protoni. E' anche importante notare che, a causa del significativo TSP raggio di area rispetto alle dimensioni molecolari in cui i protoni possono essere visti come a livello locale libero da molecole - sono donatori.

Con questa presa in considerazione sincrone protoni loro transizioni da molecole alla griglia di H-bond possono essere considerati come un flusso di protoni

termici, che vengono catturati da centri griglia molecole di ossigeno di H-bond.

Passiamo ora all'analisi della formazione di una griglia di H-bond. Nel interazione di legami idrogeno tra loro [9] Occorre processi raffigurato nella Figura 1.

Si noti che nel RPE, come nella griglia intera molecola dovrebbe essere data simmetriche proprietà donatore-accettore. Così molecole kA H_2O sono doppie donatore simmetriche e accettore di protoni, quindi nelle condizioni di TSP ($T = T_e$) nelle regioni locali di raggio $R = 10^{-6}$ M sorgono flussi sincroni di protoni che possono riempire tutti i centri liberi dell'ossigeno della loro cattura.

Come risultato, le reti H_2O molecola sono doppie donatori e accettori di protoni. Ciò è mostrato schematicamente in figura 2.

Tuttavia, una semplice analisi della struttura a griglia con il tipo PRE Figura 2 possiamo vedere che nella regione $T > T_e$ griglia è instabile rispetto alla divisione in gruppi tridimensionali self-contained (TS). Questa instabilità in particolare per il fatto che a $T > T_e$ c'è una forte curvatura delle linee di legami idrogeno, a seguito della quale può essere un cambiamento nella struttura spaziale della locale associazione di molecole con la griglia (superficie) sul volume. Qui di seguito si assume che il cambiamento strutturale in combinazione specifica di molecole, il numero di link sul PRE è mantenuta inalterata.

Per valutare le possibili dimensioni e la forma spaziale del TS, è necessario innanzitutto identificare la direzione delle forze IR atomi di molecole diverse.

I protoni possono subire transizioni da molecole di H-bond nette devono essere pre-indebolito l'impatto su di esse del campo elettrico degli elettroni di valenza (EDEV) atomi di idrogeno di molecole di H_2O . A quanto pare, l'indebolimento dell'influenza EDEV in protoni si ottiene "pull" di orbite chiuse lungo i loro assi principali. Nel caso di RPE prerequisito per l'orientamento parallelo delle orbite chiuse degli elettroni di valenza, cioè, "Parade" di orbite chiuse è fornito da PB forze atomi di

molecole diverse che utilizzano il parametro α dipendente da influenze esterne.

Pertanto, nella direzione delle forze IR dovrebbe assumere la direzione degli assi principali della "sfilata" di elettroni di valenza chiusi.

Infatti, dall'identità, in direzione "tirare" di orbite chiuse con la direzione dello spostamento protoni sincroni da molecole alla griglia di H-bond, ne consegue che la parte estesa del TS deve coincidere con la lunghezza totale di H-bond riempito di protoni PRE shell, vale a dire deve essere pari alla lunghezza totale di 8 legami idrogeno meno modificare la struttura molecolare della configurazione spaziale del numero di legami idrogeno in esso persiste.

In altri settori, dove non ci sono fiumi di dimensioni protoni sincrone della struttura molecolare non cresce e le dimensioni originali vengono mantenuti senza modifiche. Come risultato, il TS prende la forma di tubi con una lunghezza pari alla somma delle lunghezze 8 legami H e diametro pari alla somma delle lunghezze dei due legami idrogeno.

Valutazione basata sulle prestazioni è facile vedere che l'UCK in forma di tubi può essere attribuito a nanostrutture [10].

Ora stimare la temperatura della divisione griglia sul UCK e il crollo del TS presso la sede della molecola. Quando TSP dalle molecole ai legami idrogeno nette vi è un ulteriore direzione della transizione, che trasforma la griglia in cluster di volume.

Secondo il concetto generale di formazione di strutture molecolari di temperatura locale sulla suddivisione della griglia di AFC può essere definita da:

$$T_{\text{d}} = 3T_o = 49,8^\circ C \quad (7)$$

Il crollo del TS su singole molecole avviene per compressione locale e rottura di quattro legami idrogeno ogni molecola del TS. Come risultato, l'acqua molecolare è stabilito tetraedrico ordine a corto raggio.

Pertanto, la temperatura è definita dal crollo del TS: $T_p = 4T_o = 66,4^\circ C$ (8)

Va notato che il valore di T_r viene raggiunta a un valore estremamente elevato del parametro α quando IR atomi di molecole diverse tutti legami intermolecolari rompono.

Conclusioni

1. È stato dimostrato che la crescita del giunto α di atomi in molecole diverse porta ad una diminuzione della polarizzabilità molecolare e un aumento della deformazione della carica di legami idrogeno.

2. Ha rivelato che il trasferimento simultaneo di un protone dal molecolare alla rete di legami idrogeno a causa della coincidenza della energia in eccesso di interazione tra gli atomi di molecole diverse, con l'energia di interazione di deformazione delle accuse di H-bond, vale a dire con l'energia della griglia carica barriera di legami idrogeno.

3. Stabilito che i protoni sincroni dopo agiscono dividere $T_d = 49,8^\circ C$ la griglia in gruppi di volume autonomi durante il crollo del TS e molecole con $T_p = 66,4^\circ C$ le molecole tornano al loro donatore.

Riassunto

Tenendo conto degli effetti esterni nel sistema idrico attraverso legami idrogeno (H-obbligazioni), prenderà in considerazione la formazione di strutture molecolari locali ha rivelato i possibili tipi e analizzato la loro struttura e le proprietà di acqua liquida spaziale.

Poiché le caratteristiche dinamiche di H-bond con α parametro adimensionale delle interazioni di risonanza (IR) gli atomi in molecole diverse.

Attraverso il parametro α espresso quasi tutte le proprietà di legami idrogeno e le caratteristiche della loro interazione legami idrogeno con l'altro.

In particolare, l'energia di legame H è determinata dall'equazione $\varepsilon_n = \varepsilon_o \alpha(1 - \alpha)$.

Oltre alla dinamica di formazione H-bond nelle strutture molecolari locali in acqua liquida ha un valore di mantenere i protoni proprietà donatore-accettore di

molecole di H_2O . È noto che la molecola H_2O è un doppio simmetrico donatore e accettore di protoni.

Negli ultimi anni è diventato chiaro che il trasferimento simultaneo di un protone dal molecolare alla rete di legami idrogeno, a differenza delle singole transizioni si verificano ad una certa temperatura $T = T_e = 43^\circ C$, e la condizione di coincidenza dell'energia eccedente l'interazione risonante tra atomi di molecole diverse PB con l'energia di interazione di deformazione oneri H-bonds, vale a dire quando (4).

A nostro avviso, una buona combinazione dei risultati dell'interazione risonante tra atomi di molecole diverse, l'interazione di legami idrogeno tra un'attività protone donatore-accettore di molecole di H_2O ci permette di costruire varie forme di associazione locale di molecole e determinare le loro caratteristiche principali (vedi fig. 1 e 2 e Tabella 1).

In particolare, gli intervalli di temperatura stimati di accadimento e l'esistenza di associazioni locali di diverse dimensioni e forme.

Nel caso di cluster di volumi autonomi (CVA) ha dimostrato che possono essere attribuiti alle nanostrutture. In particolare, si è dimostrato che CVA non ha bisogno di avere un protone attività di donatore-accettore, e la loro fase è l'acqua, a differenza di un acqua convenzionale non dovrebbe dissipare.

Studi hanno dimostrato che la presenza nella fase acquosa grazie alla CVA bassa costante dielettrica rende più efficiente per uso industriale.

References:

1. Antonchenko I.Ya., Davydov A.S., Ilin V.V. 1991. Basic physics of water. p.668
2. Tsyun Cyue-sen. 1965. Physical mechanics. 544p.
3. Davydov A.S. 1963. Quantum mechanics, approved by the Ministry of Higher and Secondary Special Education as a textbook for universities. 744p.
4. Abdullaev A.A. 1968. Symmetries of quantum oscillator systems. p. 1339.

5. Abdullaev A.A. 2013. Network of hydrogen bonds and the criteria of its division in liquid water. p. 30-31.
6. D. Chang. 1980. "Physical chemistry with applications to biological systems". p. 663.
7. Omarov M.A., Abdullaev A.A. 2003. The structure of liquid water and water treatment for waterflood oil and pore-bearing media. 252p.
8. Zatsepina G.N. 1987. "Physical properties and structure of water". 171p.
9. Zundel G.G. 1972. Hydration and intermolecular interaction. p.403
10. Abdullaev A.A., Rabadanov G.N. 2013. "Electric and magnetic properties of aqueous nanostructures". P.28-31.

Tabella 1

Modificare le dimensioni e la forma della locale associazione di molecole con l'aumentare della temperatura

№	Nome della locale associazione di molecole	Temperatura per l'emergere di forme locali di associazione, T°C	Intervallo di temperatura di esistenza di forme di associazione di molecole T°C
1	H-obbligazioni nette con le molecole di idrogeno attivo	33,2	33,2<T≤43
2	H-obbligazioni nette con le molecole di idrogeno-saturi	43	43<T≤49,8
3	Risoluzione della griglia di H-bond nei tre-dimensionale gruppi autonomi	49,8	49,8<T<66,4
4	Il crollo del TS nei protoni sincroni molecola sotto forma di obbligazioni "penzoloni"	66,4	66,4<T<...

Fig.1.

La Figura 1 mostra una maglia elemento rappresentativo nelle molecole di H-bond sono un protone. Pertanto, ogni molecola (cerchio) sono simmetriche donatore e accettore di protoni, come mostrato in figura 1 le indicazioni di linee di legami idrogeno.

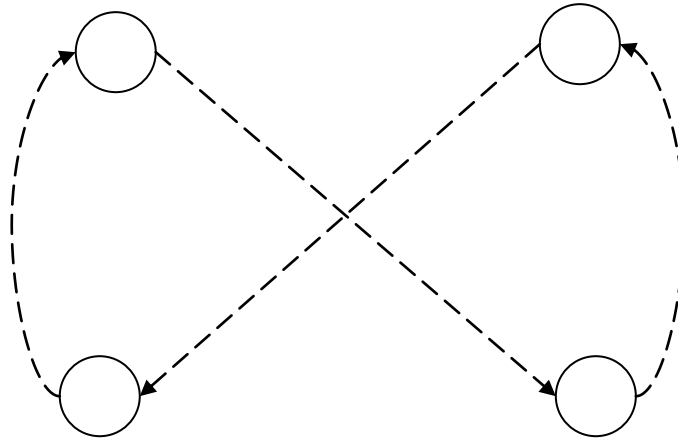


Fig. 2. protoni sincroni, come catturata da molecole di ossigeno quando i centri di sforzo (form.4) sono indicati da linee continue.

