



УДК 519.713

© 2010 г. **Е.Л. Еремин**, д-р техн. наук
(Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск),
В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

КИБЕРНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОМЕНТОВ ИНЕРЦИИ ЗАКРЕПЛЕННЫХ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

Рассматриваются поляризационные характеристики мономолекулярного слоя воды, закрепленного на кислой или щелочной поверхности.

Ключевые слова: оптическая электронная оболочка; молекулярные моменты инерции.

Введение

В последнее время весьма существенный интерес вызывает всестороннее изучение самых различных процессов, происходящих в воде на молекулярном уровне. Например, как показывают новейшие биофизические исследования, нейрофизиологические свойства клеток определяются диэлектрической проницаемостью их мембран, которая в свою очередь обусловливается поляризационными характеристиками закрепленных на них молекул H_2O . При этом причина названного обстоятельства связывается с возможностью перемены знака поверхностного заряда клеточной мембраны, которая приводит к тому или иному способу закрепления одномолекулярного слоя воды на сопрягаемой с ним поверхности.

Следует отметить, что результаты, представленные в первой части описываемого исследования, в конечном итоге представляют собой типовой расчет моментов инерции уравновешенной системы, т.е. решение стандартной задачи классической механики. Однако аналогичные изыскания, проводимые другими авторами, как правило, не принимают во внимание объективное обстоятельство наличия у молекулы воды электронной оболочки, образованной электронными орбиталями химически связанных атомов водорода и кислорода.

В свою очередь, адекватное описание электронно-ядерной конфигурации молекулы воды само по себе является весьма актуальной проблемой, поэтому ее достаточно эффективное метафизическое решение, найденное в рамках кибернетической теории поляризации диэлектриков, может оказаться весьма полезным для специалистов, занимающихся исследованиями живых систем, проводимыми на стыке физики конденсированного состояния и биофизики.

Виртуальная модель внешних размеров H₂O

Традиционное моделирование электронной конфигурации молекулы любого вещества может быть выполнено с помощью компьютерной визуализации электронных оболочек составляющих его частиц, представленных несжимаемыми сферами, фокусы которых оказываются совмещенными с центрами ядер атомов, образующих молекулярный каркас формульной единицы соответствующего химического соединения.

Как известно, атомный каркас молекулы H₂O, образованный связанными ядрами двух водородов и одного кислорода, может быть представлен равнобедренным треугольником, тупой угол НОН и стороны ОН которого составляют:

$$\alpha = 104,523^\circ; \quad R = 0,75597 \cdot 10^{-10} \text{ м.} \quad (1)$$

Кроме того, в работе [2], основанной на использовании так называемой кибнетической модели комплексной диэлектрической проницаемости конденсированного образца [3, 4], было показано, что оптимизированные значения эффективных зарядов $Z_{эф}$ атомного остатка, действующих на внутренние и оптические электроны частицы O^{-2} , позволяют определить радиусы всех ее электронных орбиталей:

$$\begin{aligned} Z_{эф1sO} &= 8 - 1 \cdot 0,30, & r_{1sO} &= 0,06872 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \\ Z_{эф2sO} &= 8 - (2 \cdot 0,85 + 1 \cdot 0,35), & r_{2sO} &= 0,35575 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \\ Z_{эф3p1O} &= 8 - (2 \cdot 1,00 + 2 \cdot 0,80 + 1 \cdot 0,15), & r_{3p1O} &= 1,12061 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \\ Z_{эф3p2O} &= 8 - (2 \cdot 1,00 + 2 \cdot 0,80 + 3 \cdot 0,15), & r_{3p2O} &= 1,20572 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \\ Z_{эф3p3O} &= 8 - (2 \cdot 1,00 + 2 \cdot 0,80 + 5 \cdot 0,15), & r_{3p3O} &= 1,30482 \cdot 10^{-10} \text{ м.} \end{aligned} \quad (2)$$

При этом величина эффективного заряда для электронов оптических орбиталей частиц H^+ , определяющая их радиусы, образуемые при окислении водорода, может быть рассчитана как [5]:

$$Z_{эф1sH} = 1 - 1 \cdot 0,30, \quad r_{1sH} = 0,75597 \cdot 10^{-10} \text{ м.} \quad (3)$$

Комплексный анализ значений линейных величин, представленных в соотношениях (1)-(3), позволяет ратифицировать следующую гипотетическую орбитальную модель электронно-ядерной конфигурации молекулы воды, схема которой приведена на рис. 1а:

во-первых, потенциальную возможность объединения 1-й 3p-орбитали кислорода с орбитами первого боровского радиуса r_0 ($0,52918 \cdot 10^{-10}$ м), характерными для стационарного атома водорода;

во-вторых, потенциальную возможность объединения 3-й 3p-орбитали кислорода с орбитами, радиусы которых соответствуют частицам H^+ ;

в-третьих, потенциальную приемлемость расположения 2-й 3p-орбитали кислорода между указанными орбитами на равном удалении от каждой из них.

В свою очередь, на основании полученных данных, принимая во внимание используемую трактовку электронной оболочки, можно реализовать трехмерную визуальную модель молекулы воды (рис. 1б).

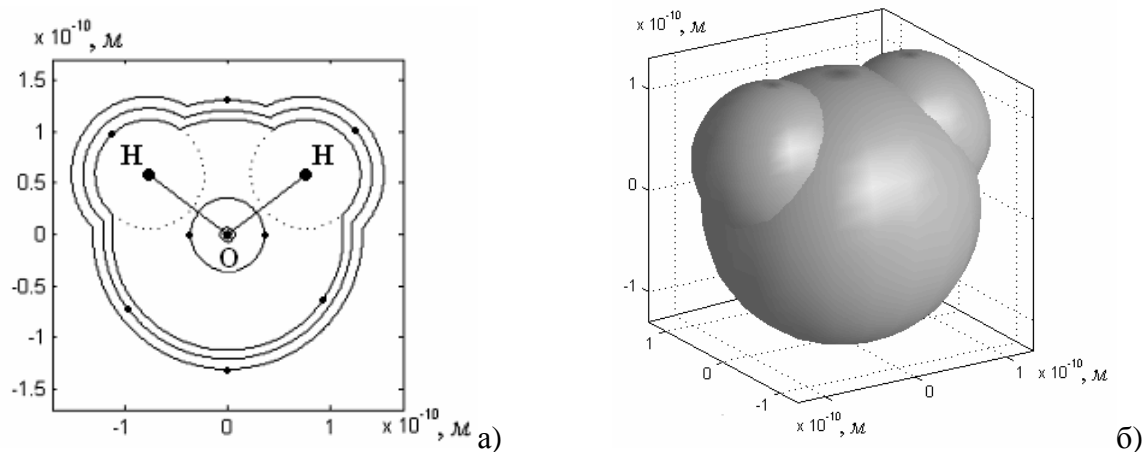


Рис. 1. Имитационная модель электронно-ядерной конфигурации молекулы воды:
 а) схема внутреннего строения при сечении по молекулярной плоскости;
 б) пространственная модель внешних пределов электронной оболочки.

Необходимо отметить, что передовые научные гипотезы, обосновывающие первопричину уникальных физико-химических свойств воды, обычно отталкиваются от геометрической формы ее молекулы. При этом они основываются на величине α валентного угла НОН (1), специфичность которой заключается в непосредственной близости к значениям углов β между высотами правильного тетраэдра, составляющих по $109,471^\circ$. Названное обстоятельство позволяет рассматривать соответствующую пространственную модель H_2O в качестве гипотетической структурной компоненты, обеспечивающей возможность осуществления одного из видов плотнейших пространственных упаковок.

В свою очередь объемная характеристика такого многогранника объективно определяется стереометрическими параметрами вписываемой в него молекулы, которые целиком зависят от конфигурации ее внешних размеров (рис. 2а).

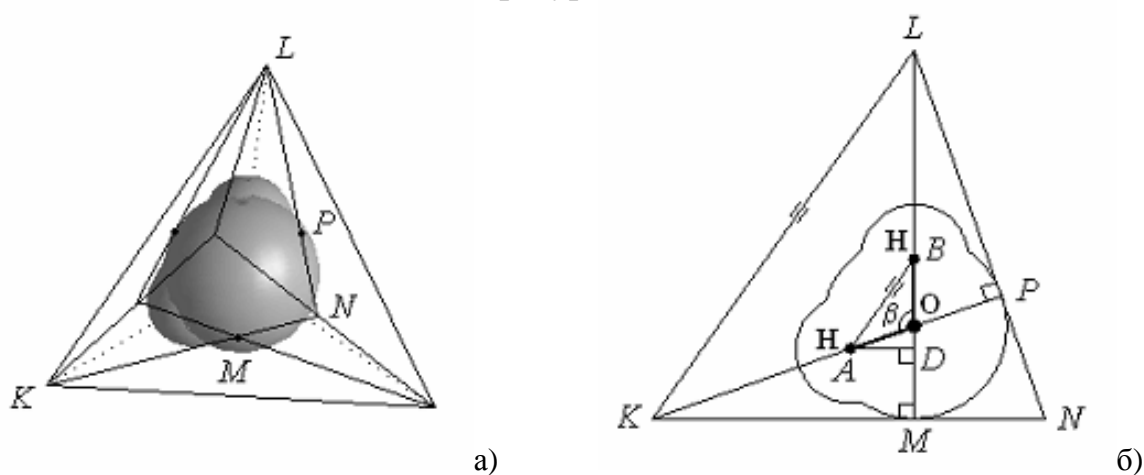


Рис. 2. Модель правильного тетраэдра, ограничивающего молекулу воды:
 а) трехмерная визуализация; б) схема разреза в молекулярной плоскости.

Рассмотрим практическое вычисление объема такого тетраэдра, основанное на использовании оптимизированного значения r радиуса 3-й $3p$ -орбиталей O^{-2} исследуемой молекулы (3), используя представленную выше схему (рис. 2б).

Сначала определим высоту h заданного многогранника:

$$\begin{aligned} \hat{O\hat{A}D} &= \frac{\pi}{2} - \left(\hat{A\hat{B}O} + \hat{B\hat{A}O} \right), \quad \hat{A\hat{B}O} = \hat{B\hat{A}O} = \frac{\pi - \beta}{2}, \Rightarrow \\ \hat{O\hat{A}D} &= \beta - \frac{\pi}{2}, \quad |OD| = |AO| \cdot \sin\left(\beta - \frac{\pi}{2}\right); \\ \frac{|BO|}{|OD|} &= \frac{|LO|}{|OM|}, \quad |BO| = |AO|, \quad \Rightarrow \quad |LO| = \frac{|BO||OM|}{|OD|} = \frac{r}{\sin(\beta - \pi/2)}; \\ h = |LM| &= |LO| + |DM| = \frac{r}{\sin(\beta - \pi/2)} + r = \frac{1 + \sin(\beta - \pi/2)}{\sin(\beta - \pi/2)} r. \end{aligned} \quad (4)$$

Затем рассчитаем длину l его ребер, необходимую для нахождения площади S любого из оснований:

$$\begin{aligned} l &= \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |LO| = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3} \sin(\beta - \pi/2)} r; \\ S &= \frac{1}{2} l^2 \sin \frac{\pi}{3} = \frac{2\sqrt{3}}{3 \sin^2(\beta - \pi/2)} r^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, объем правильного тетраэдра, описанного вокруг изолированной молекулы воды, вытекающий на основании использования кибернетической модели ее электронной конфигурации, оказывается равным:

$$V_{тетр} = \frac{1}{3} hS = \frac{2\sqrt{3}}{9} \cdot \frac{1 + \sin(\beta - \pi/2)}{\sin^3(\beta - \pi/2)} r^3 = 30,159 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3. \quad (6)$$

В целях количественной оценки достоверности полученного результата можно использовать контрольное значение величины элементарного объема, приходящегося на каждую отдельно взятую H_2O при нормальной (комнатной) температуре, определяемого как:

$$V_{эле\text{м}} = \frac{(2m_{\text{H}} + m_{\text{O}})aem}{\rho} = 30,003 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3, \quad (7)$$

где ρ – физическая плотность воды при 25 °С, равная 997,1 кг/м³; m_{H} и m_{O} – атомные массы водорода и кислорода; aem – атомная единица массы в кг.

Для обеспечения чистоты проводимого вычислительного эксперимента, определим объемы подобных тетраэдров, используя в формуле (6) вместо оптимизированного значения r его традиционные аналоги, рассматриваемые в виде ионных радиусов по таблицам Полинга ($1,40 \cdot 10^{-10}$ м) и Гольдшмидта ($1,32 \cdot 10^{-10}$ м):

$$\begin{aligned} V_{тетр}^{\text{Полинг}} &= 38,023 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3; \\ V_{тетр}^{\text{Гольдшмидт}} &= 31,870 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3. \end{aligned} \quad (8)$$

Принимая во внимание практически полное взаимное соответствие расчетной $V_{тетр}$ (6) и эмпирической $V_{эле\text{м}}$ (8) величин элементарного объема молекулы воды, можно констатировать, что предлагаемая «кибернетическая» трактовка ее электронно-атомной структуры является наиболее адекватной реальным физико-химическим свойствам исследуемой жидкости.

Методика расчета моментов инерции свободной молекулы

Учитывая многократную разницу между массами атомных ядер и электронов, для расчета инерционных характеристик молекулярных систем обычно используют физико-математическую модель, описывающую соответствующую совокупность химических элементов, представленных материальными точками.

Таким образом, расчет моментов инерции J молекулы воды может быть выполнен с помощью формулы классической механики вида:

$$J = \sum_{i=1}^K m_i R_i^2, \quad (9)$$

где K – общее число химических элементов, образующих исследуемую молекулу; m_i – табличные значения их атомных масс; R_i – расстояния между атомными ядрами и центром вращения молекулярной системы.

Рассмотрим методику расчета моментов инерции молекулы H_2O , находящейся в свободном состоянии (рис. 3).

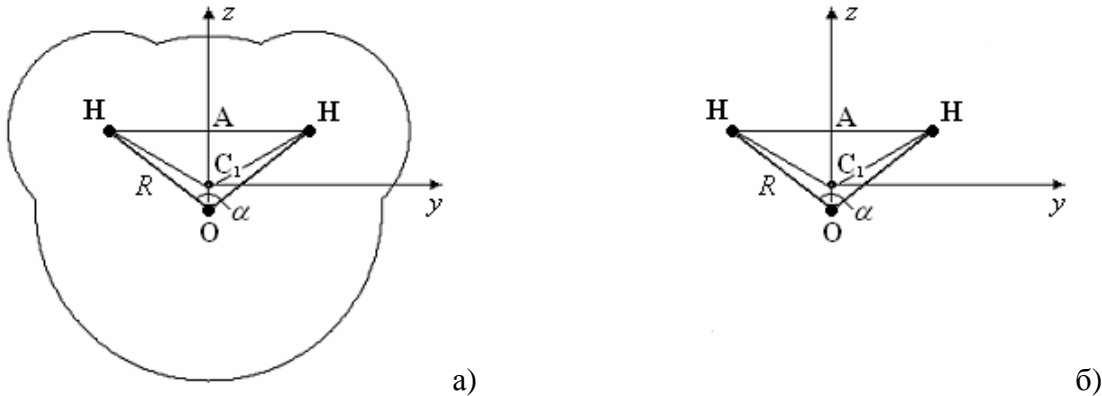


Рис. 3. Схемы свободно размещенной, изолированной молекулы воды: а) с учетом наличия электронной оболочки; б) без учета оболочки.

Очевидно, что в данном случае центр вращения системы C_1 совпадает с местоположением ее центра масс, для нахождения которого составим уравнение равновесия системы:

$$m_O |C_1 O| = 2m_H (|AO| - |C_1 O|). \quad (10)$$

Учитывая, что длина отрезка AO равна

$$|AO| = R \cos \frac{\alpha}{2} = 0,58585 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad (11)$$

расстояния между центром масс молекулы и ядрами ее атомов могут составить:

$$|C_1 O| = \frac{2m_H |AO|}{2m_H + m_O} = 0,06556 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \quad (12)$$

$$|C_1 H| = \sqrt{(|AO| - |C_1 O|)^2 + \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2} = 0,91852 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Следовательно, момент инерции J_{x1} свободной молекулы воды, рассчитываемый относительно первой молекулярной, равен:

$$J_{x1} = 2m_H |C_1 H|^2 + m_O |C_1 O|^2 = 2,93839 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (13)$$

Принимая во внимание удаление частиц кислорода и водорода от молекулярной оси y , второй момент инерции представляет собой:

$$J_{y1} = 2m_H (|AO| - |C_1O|)^2 + m_O |C_1O|^2 = 1,02037 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (14)$$

И, наконец, расчет момента инерции свободной молекулы воды при ее вращении вокруг оси z дает результат:

$$J_{z1} = 2m_H \left(R \sin \frac{\alpha}{2} \right)^2 = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (15)$$

Сравнение полученных значений молекулярных дипольных моментов H_2O с литературными данными [1] показывает их практически полное совпадение. При этом разница выше приведенных и справочных величин наблюдается, начиная только с третьего знака после запятой. Данное обстоятельство объективно объясняется более высокой точностью авторских вычислений, выполненных с помощью ЭВМ, по сравнению с классическими результатами, полученных ручным способом.

В заключение можно отметить, что, учитывая рамки используемой физико-математической модели, принятый во внимание факт наличия или отсутствия у молекулы воды электронной оболочки никоим образом не влияет на численные значения ее молекулярных моментов инерции.

Расчетные значения моментов инерции закрепленных молекул

Рассмотрим последовательность расчета моментов инерции H_2O (используя соответствующую схему), закрепленной на положительно заряженной поверхности своим отрицательным полюсом – кислородом, учитывая существование у молекулы внешней электронной оболочки (рис. 4а).

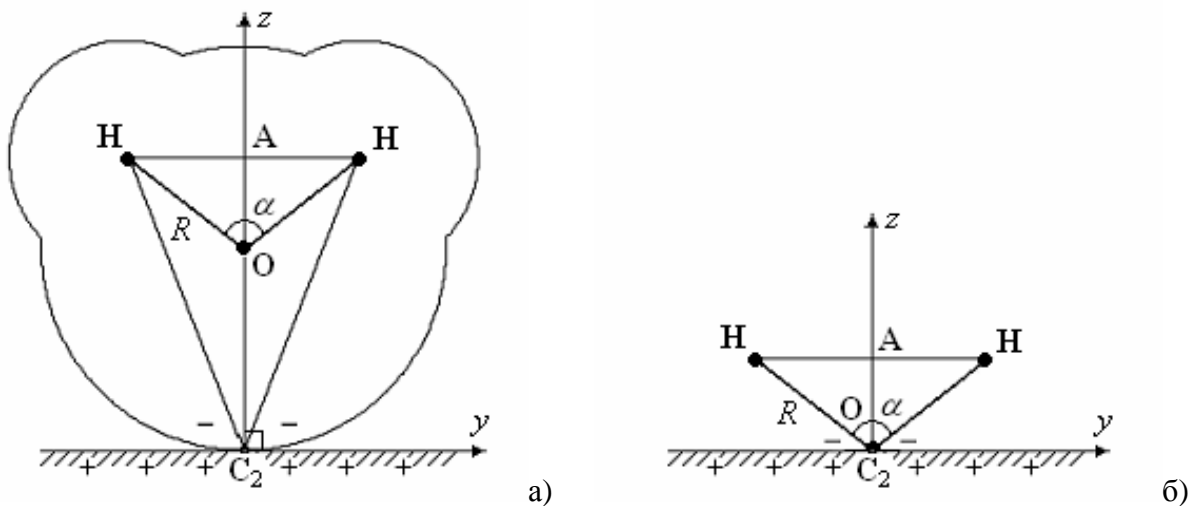


Рис. 4. Схемы молекулы воды, закрепленной кислородным полюсом: а) с учетом наличия электронной оболочки; б) без учета оболочки.

Очевидным, что в данном случае центр вращения C_2 изучаемой системы определяется внешней границей третьей p -орбитали частицы кислорода. При этом необходимые для расчетов расстояния могут быть найдены как:

$$\begin{aligned}
|AO| &= R \cos \frac{\alpha}{2} = 0,58585 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \\
|C_2O| &= r = 1,29594 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \\
|C_2H| &= \sqrt{(|AO| + |C_2O|)^2 + \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2} = 2,02833 \cdot 10^{-10} \text{ м}.
\end{aligned}
\tag{16}$$

Следовательно, расчетные моменты инерции молекулы воды, закрепленной на положительно заряженной (кислой) поверхности, равны [5]:

$$\begin{aligned}
J_{x2} &= 2m_H |C_2H|^2 + m_O |C_2O|^2 = 58,39228 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_{y2} &= 2m_H (|AO| + |C_2O|)^2 + m_O |C_2O|^2 = 56,47425 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_{z2} &= 2m_H \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2 = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2.
\end{aligned}
\tag{17}$$

Проведенная количественная оценка двух первых значений представленных величин показывает, что моменты инерции, соответствующие вращению H_2O вокруг молекулярных осей x и y , в рассмотренном варианте ее закрепленного состояния существенно увеличиваются по сравнению с их аналогичными инерционными параметрами для свободной молекулы (13) и (14). При этом третий момент инерции остается неизменным, что целиком и полностью объясняется совпадением геометрического расположения молекулярной оси z с направлением центральной оси симметрии молекулы воды.

С другой стороны, методика определения молекулярных инерциальных моментов H_2O , проводимых без рассмотрения ее электронной оболочки, обуславливает необходимость учета обстоятельства того, что в данной ситуации центр вращения изучаемой молекулярной системы оказывается совмещенным с геометрическим центром атомного ядра кислорода (рис. 4б).

Практические расчеты, соответствующие рассматриваемому случаю, дают следующие численные результаты:

$$\begin{aligned}
J_{x2} &= 2m_H R^2 = 3,06696 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_{y2} &= 2m_H \left(R \cos \frac{\alpha}{2}\right)^2 = 1,14893 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_{z2} &= 2m_H \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2 = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2.
\end{aligned}
\tag{18}$$

В свою очередь, вычисления моментов инерции молекулы H_2O , закрепленной на отрицательно заряженной поверхности своим положительным полюсом – частицами водорода, выглядят следующим образом.

Принимая во внимание наличие электронной оболочки, центр вращения C_3 размещается в точке пересечения молекулярной оси симметрии с поверхностью закрепления, расположенной на уровне внешней границы электронной оболочки, рассматриваемой со стороны частиц водорода (рис. 5а).

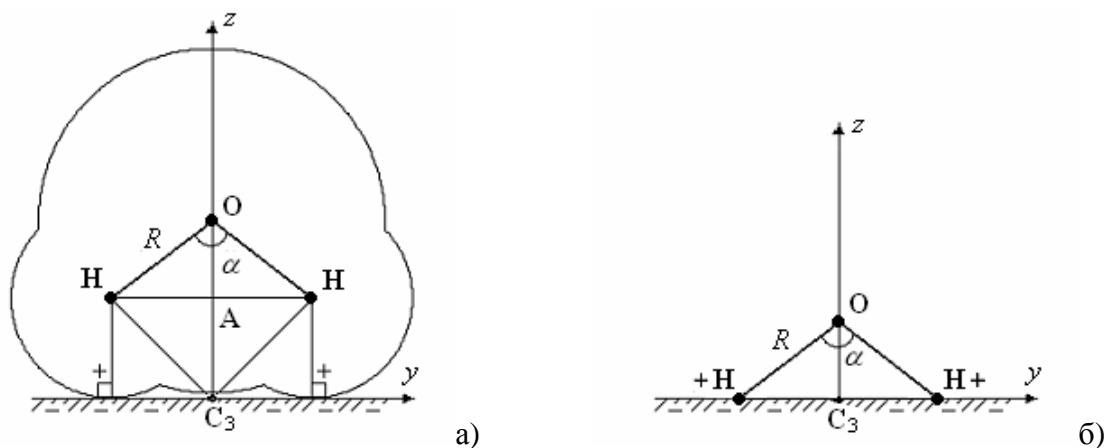


Рис. 5. Схемы молекулы воды, закрепленной водородным полюсом: а) с учетом наличия электронной оболочки; б) без учета оболочки.

При этом расстояния между ним и атомными ядрами составят:

$$|C_3O| = r_{1sH} + |AO| = 1,34182 \cdot 10^{-10} \text{ м};$$

$$|C_3H| = \sqrt{r_{1sH}^2 + \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2} = 1,06979 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (19)$$

Таким образом, расчетные моменты инерции H_2O , закрепленной на положительно заряженной (щелочной) поверхности, оказываются равными [5]:

$$J_{x3} = 2m_H |C_3H|^2 + m_O |C_3O|^2 = 51,66617 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2;$$

$$J_{y3} = 2m_H r_{1sH}^2 + m_O |C_3O|^2 = 49,74814 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2;$$

$$J_{z3} = 2m_H \left(R \sin \frac{\alpha}{2}\right)^2 = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (20)$$

Количественная оценка разницы найденных величин (17) и (20) показывает, что при втором способе закрепления молекулы воды ее моменты инерции, определяемые относительно двух первых осей, уменьшаются примерно на 12 и 15 %.

С другой стороны, определение моментов инерции H_2O , проводимое без учета электронной оболочки, обуславливает размещение центра вращения C_3 на уровне водородных ядер (рис. 4б), а соответствующие расстояния составят:

$$|C_3O| = R \cos \frac{\alpha}{2} = 0,58585 \cdot 10^{-10} \text{ м};$$

$$|C_3H| = R \sin \frac{\alpha}{2} = 0,75675 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (21)$$

Практические расчеты, соответствующие разбираемому анализируемому случаю, дают следующие численные результаты:

$$J_{x3} = 2m_H |C_3H|^2 + m_O |C_3O|^2 = 16,37171 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2;$$

$$J_{y3} = m_O |C_3O|^2 = 9,11870 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2;$$

$$J_{z3} = 2m_H |C_3H|^2 = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2. \quad (22)$$

Анализ количественной разницы величин вида (18) и (22) показывает, что при втором способе закрепления молекулы воды, теоретическое рассмотрение которого игнорирует факт существования у нее электронной оболочки, моменты инерции, вычисляемые относительно двух первых молекулярных осей, увеличиваются приблизительно в 5 и 9 раз по отношению к первому такому же случаю.

Заключение

На основании результатов, представленных в первой части описываемого исследования, становится возможным сформулировать следующие выводы.

Во-первых, значения моментов инерции закрепленной молекулы воды, вычисленные с учетом наличия у нее электронной оболочки, оказываются значительно больше ее инерционных характеристик в свободном состоянии. При этом аналогичные расчеты, проводимые без учета электронной оболочки H_2O , дают величины, порядок которых оказывается близким к инерционным параметрами свободной молекулы.

Во-вторых, моменты инерции молекулы воды, закрепленной на поверхности частицей кислорода, найденные с учетом существования электронной оболочки, оказываются больше, чем ее моменты инерции в случае закрепления частицами водорода. В свою очередь, расчеты, реализуемые без учета наличия электронной оболочки, дают противоположные результаты.

Таким образом, можно констатировать, что приведенные в работах [6 – 8] данные, основанные на расчетах моментов инерции молекулы воды без учета существования у нее электронной оболочки, требуют объективного критического пересмотра и соответствующей доработки.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Эйзенберг Д., Кауцман В.* Структура и свойства воды. – Л.: Гидрометеиздат, 1975.
2. *Костюков Н.С., Еремина В.В., Тюрина С.Ю.* Построение оптимальной модели процесса упругой электронной поляризации воды // Перспективные материалы. – 2006. – № 6. – С. 27-33.
3. *Костюков Н.С., Еремин И.Е.* Кибернетическая модель процесса упругой электронной поляризации диэлектрика // Электричество. – 2004. – № 1. – С. 50-54.
4. *Костюков Н.С., Еремин Е.Л., Еремин И.Е.* Имитационное моделирование диэлектрической проницаемости конденсированных материалов: ультрафиолетовый и видимый спектры частот. – Благовещенск: АмурКНИИ ДВО РАН, 2001.
5. *Еремина В.В.* Сравнительный анализ моментов инерции свободной и закрепленной молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2009. – № 1(19). – С. 46-54.
6. *Еремина Н.В., Костюков Н.С.* Диэлектрические свойства молекулы воды, закрепленной на поверхности твердого тела // Стекло и керамика. – 2007. – № 7. – С. 16-18.
7. *Еремина Н.В., Костюков Н.С.* Диэлектрические характеристики увлажненной поверхности высоковольтных изоляторов // Электричество. – 2008. – № 8. – С. 36-40.
8. *Еремина Н.В., Костюков Н.С.* Поляризация монослоя воды на поверхности диэлектрика // Известия СамНЦ РАН. – 2008. – Т. 10, № 3. – С. 775-782.

E-mail:

Еремин Е.А. – ERemin@mail.khstu.ru;

Еремина В.В. – banysheva@mail.ru.