

## ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕМЕНТОВ САМОПОДОБИЯ ВОДЫ

В.А. Резников

С-ПбГУ, E-mail: V.Reznikov@pobox.spbu.ru

Оптическая плотность ( $n$ ) воды и совместного конденсата кислород – параводород совпадают вблизи температур кипения последних при нормальном давлении. По отношению к воде большая плотность  $O_2$ - $H_2$ -конденсата  $\rho \approx 1,213$ - $1,225$  г/см<sup>3</sup> предполагает наличие оболочек с объемом полости  $\sim 15$ - $18\%$  при небольшой пористости между ними. При криогенных температурах плотность аморфного льда, полученного всесторонним сжатием  $\rho \approx 1,25$  г/см<sup>3</sup>, или льда-V ( $\rho \approx 1,231$  г/см<sup>3</sup>) совпадают с плотностью конденсата кислорода и параводорода. Термическое изменение плотности  $O_2$ - $H_2$ -конденсата коррелирует с термическим изменением плотности воды, т.е. вода проявляет свойство однокомпонентного конденсата с молекулярной массой элементов самоподобия  $>400$  по пролонгированию зависимости температур плавления и кипения гидридов VI и VII групп таблицы Д.И. Менделеева. Эта оценка массы  $(H_2O)_n$ -оболочек согласуется с аномально высокой концентрацией кластеров  $(H_2O)_{20-32}$  в составе паровой фазы (по данным массспектрометрии) и аномально низкой подвижностью кластеров  $H+(H_2O)_n$  в газовой фазе (Томсон). Клатратная структура (витрон) естественна для 20 и более взаимодействующих однотипных молекул вследствие уменьшения колебательной энергии в замкнутой системе. В конденсате витроны устойчивы при размерах  $\sim 1$ - $3$  нм. Оболочечная модель элементов самоподобия отвечает аномально высокой упругости льда и микрокапель воды. В то же время гидрирование металлов в воде при повышенных давлениях, кислотные свойства сверхкритической воды, высокая электропроводность при  $0$ - $2^\circ C$  и  $H$ -проводность льда  $1h$  - свойства твердых электролитов. В клатратной модели эти свойства следуют из делокализации 11 и более  $H^+$  на поверхности оболочки:  $H_n-x(OH)_n$ . В тетраэдрической координации кислорода оболочка более устойчива за счет  $O-O$  взаимодействия и тогда конденсат  $H_n-x(OH)_n$  представим как  $O_2$ - $H_2$ -конденсат.

Таблица энергетической эквивалентности  $C_{60-70}$  и  $(H_2O)_n$ -оболочек, по наиболее вероятным моделям регулярных молекулярных центров (РМЦ) элементов самоподобия.

№	$C_{60-70}$ эВ	$H_2O$ $\bar{E}$	$H_2O$ $\Delta E$
1	$E_a C_{60} = 2,65$	$\{E_{B-a}OH_2, E_B(O-O)\} E_B H_2^+$	
2	$E_a C_{70} = 2,68$ - $2,69$	$E_B(H_2 \leftrightarrow H_2^+), E_a OH$ $E_{B-a}OH, E_a H^+$	$E_B(H_2 \leftrightarrow H_2^+) \uparrow E_a O_2$ $\{E_B H_2, E_a H^+\} \uparrow E_a H^0 - 536 \text{ см}^{-1}$
3	$E_a 2C_{60} = 1,865$	$E_a(H^+, O^0)$	$\bar{E} \{E_B H_2, E_a H^+\} \uparrow E_a(H^0 \leftrightarrow H^+) - 12 \text{ см}^{-1}$
4	$E_B 2C_{60} - 776 \text{ см}^{-1}$	$E_B OH, E_a(H^0 \leftrightarrow H^+)$	$E_B H_2 \uparrow \{E_B(O-O), E_a O_2\}$
5	$E_B C_{60} - 1568 \text{ см}^{-1}$	$\bar{E} \{E_B OH, E_a H^+\} - 696 \text{ см}^{-1}$	$E_B OH \uparrow E_a(2H^+) + 160 \text{ см}^{-1}$
6	$E_B C_{60} - 776 \text{ см}^{-1}$	$E_B H_2 - 544 \text{ см}^{-1}, E_a H^+$	$E_B O_2^- \uparrow E_a H^0 + (184 + 88) \text{ см}^{-1}$
7	$\bar{E} \{E_B C_{60} - \omega, E_B 2C_{60}\}$	$E_B(O-O), E_B O_2^-$	$E_B H_2 - 1596 \text{ см}^{-1} \uparrow E_a(2H)^+$
8	$E_B C_{60} = 3,435$	$E_B(OH, H_2^+) - 680 \text{ см}^{-1}$ $(E_B OH, E_a H^+) + 184 + 680 \text{ см}^{-1}$	$E_B H_2 - 1648 \text{ см}^{-1} \uparrow E_a H^0 + 680 \text{ см}^{-1}$
	$\bar{E} \{E_B C_2^+, E_B C_2^-\}$	$(E_B H_2 O + 1596 \text{ см}^{-1}) - 12 \text{ см}^{-1}$ $(E_B H_2 - 1646 \text{ см}^{-1}) + 64 \text{ см}^{-1}$	$E_B O_2 \uparrow E_a H^0 + 536 \text{ см}^{-1}$ $E_B H_2 O \uparrow E_a H^0 + 536 \text{ см}^{-1}$
11	$\bar{E} \{E_B C_{60} - \omega, E_a 2C_{60}\}$	$E_a H^+ + 44 \text{ см}^{-1}$ а. $E_B(H_2 \leftrightarrow H_2^+) \uparrow E_a(H_2O)_n + 32 \text{ см}^{-1}$ в. $\bar{E} \{E_B OH, E_a H^+\} - 680 \text{ см}^{-1} \uparrow E_a(H_2O)_n + 64 \text{ см}^{-1}$	

По п.5 система взаимосвязанных C-атомов, возбужденных в присутствии лиганда энергетически эквивалентна системе взаимосвязанных OH-групп, возбужденных в присутствии  $(H^+)^-$ . Из п. 5 следует, что  $\omega = 160 \text{ см}^{-1}$ - трансляционные колебания в системе взаимосвязанных оболочек, (традиционная интерпретация полосы). Аналогично, по п.8 коллективизированные  $\pi$ -состояния совокупности C-молекул в высокосимметричной координации с точностью до либрационных колебаний энергетически эквивалентны системе взаимосвязанных РМЦ (OH - $H_2^+$ ), что выражено и соответствующим переходом. По п.9 система взаимосвязанных молекул  $C_2^+$  с точностью до деформационных колебаний оболочки энергетически эквивалентна системе взаимосвязанных O-O, а система взаимосвязанных молекул  $C_2^+ - C_2^-$  с точностью до вращательных колебаний оболочки энергетически эквивалентна коллективизированным состояниям

делокализованных парных Н-центров. Переход также осуществляется на ЭС, определяемые связующими Н-атомами, но уже с энергетического уровня подсистемы взаимосвязанных О-О в составе оболочки.

По п.1 электронная плотность (ЭП) континуума вокруг оболочки эквивалентна ЭП совокупности  $H_2^+$  и находится в равновесии с РМЦ  $OH \leftrightarrow (O-O)$  по модели О-Н-О.

По п.2 при повышении полярности оболочек происходит перераспределение ЭП в сторону статистически большего времени жизни центров  $(H^+)^-$  и  $(H_2 \leftrightarrow H_2^+)$ , что также отражено соответствующими переходами, в частности либрация совокупности Н-атомов в оболочке ( $536 \text{ см}^{-1}$ ) отвечает смещению  $H^+$  между оболочками. Из п.п. 6, 9 таблицы следует взаимосвязь  $\omega = 536 \text{ см}^{-1}$  со смещением водорода между коллективизированными ЭС в составе оболочки и  $\omega = 544 \text{ см}^{-1}$  между ними.

По п.3 между оболочками с низкой степенью эллипсоидальности ЭП понижена и определяется РМЦ  $(O - H^+ - O)^-$ , тогда как переходы характеризуются статистически диссоциированными квазимолекулами между оболочками и РМЦ  $(H^0 \leftrightarrow H^+)$  в составе оболочек.

По п.4 также как и в случае димеров  $2C60$  между  $(H_2O)_n$ -оболочками, определяемыми РМЦ  $OH - (H^0 \leftrightarrow H^+)$  существует резонансный тип взаимодействия, которому соответствует переход между ЭС взаимосвязанных парных кислородных центров и взаимосвязанных квазимолекул  $H_2$ . В этом контексте необходимо допустить различные коллективизированные ЭС, связанные с межглобулярными делокализованными парными Н-центрами и ЭС собственно оболочек. Действительно, по п.6 с точностью до энергии деформации С-С связей система взаимосвязанных С-молекул энергетически эквивалентна коллективизированным состояниям взаимосвязанной системы межглобулярных  $(H^+)^-$ , тогда как по п.8 существуют коллективизированные  $((H^+ - \bar{e})^-)$  в составе оболочки.

В соответствии с п.п. 6, 8  $\omega = 184 \text{ см}^{-1}$  отвечает эквивалентным трансляционным колебаниям в составе оболочек, где  $\Delta E = 24 \text{ см}^{-1}$  следует рассматривать как переход, связанный с изменением возбужденного состояния водорода при переходе от водородного к кислородно-водородному конденсату. Этой модели соответствует взаимосвязанное изменение спина в атоме водорода ( $21 \text{ см}^{-1}$ ) и системе квазимолекул  $O_2^+$ .

Скрытая теплота плавления ( $68 \text{ мэВ}$ ) соответствует энергетическим затратам на колебательный переход атомарного водорода между глобулярными оболочками. Энергетически полоса  $680-696 \text{ см}^{-1}$  отвечает резонансу межглобулярных трансляций, определяемых системой взаимосвязанных  $H_2 \leftrightarrow (2H)^+$  и колебаний, связанных со смещением атомарного водорода. Следовательно, резонанс межглобулярных трансляций с внутри- и межглобулярными смещениями атомов водорода соответствует энергии Н-связи ( $155 \text{ мэВ}$ ).

Взаимодействие оболочка  $\leftrightarrow$  димер (п.10) энергетически эквивалентно смещению ЭП делокализованных пар  $(H^+ - H^+)$  и коллективизированных центров  $(OH - H^+)$  на энергетический уровень  $E_a(H_2O)_n$ , что соответствует равновесию оболочек между совокупностью  $(H^+ - \bar{e})^-$ . По этой модели поправка  $\omega = 44 \text{ см}^{-1}$  также отвечает парным Н-центрам по модели перехода (а.), а по модели перехода (в) предполагает вращательное колебание одиночной оболочки и либрацию в составе димера.