

## Диэлектрическая спектроскопия и структура воды и водных растворов

А.К. Лященко

Институт Общей и Неорганической химии им. Р.С. Курнакова РАН, г. Москва, Россия  
[aklyas@mail.ru](mailto:aklyas@mail.ru)

Широкополосная диэлектрическая спектроскопия во всей области ориентационной поляризации (до  $800\text{ см}^{-1}$ ) представляет интенсивно развивающийся метод исследования жидкостей и растворов. Рассмотрены особенности динамики воды среди других жидкостей. Предложена структурно-кинетическая модель  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{D}_2\text{O}$ , использующая теоретическую схему “ограниченных ротаторов”, где нами рассматриваются трансляционно-вращательные движения молекул (на малые и большие углы), приводящие к появлению молекул в пустотах-междоузлиях исходной тетраэдрической сетки Н связей. Это подтверждается данными пространственных функций распределения, полученными нами в компьютерном моделировании методом Монте-Карло. Экспериментальные спектры комплексной диэлектрической проницаемости и поглощения в области  $10\text{-}800\text{ см}^{-1}$  описываются на структурной основе. Интерпретируются особенности молекулярного движения, отражающиеся в спектрах мм и суб мм областей. Определены высокочастотная граница основной дебаевской области и ее характерные черты, показывающие отсутствие “долгоживущих” структурных процессов релаксации в равновесной воде, связанных с так называемой “памятью” воды.

На основе структурных представлений о комплементарности конфигураций гидратной оболочки и объемной воды рассмотрен переход к вводно-неэлектролитным системам. Представлена модель молекулярного механизма гидрофобной гидратации, в которой описываются спектры диэлектрической проницаемости и поглощения, а также релаксационные изменения и другие свойства растворов неэлектролитов в начальной области концентраций, где упорядоченность строится на основе исходной структуры воды.

В едином подходе для большого числа систем рассмотрены общие отношения между структурными эффектами в растворах электролитов, элементарной динамикой молекул воды в гидратных оболочках ионов (масштаб самых быстрых движений), диэлектрической релаксацией растворов (коллективная динамика за большие времена), статическими диэлектрическими константами и термодинамической активностью воды растворов. Анализ ведется на основе предложенной модели структурной организации растворов электролитов в широкой области концентраций, которая использует принцип комплементарности гидратных оболочек ионов и объемной воды как определяющий параметр.