

Механизм ТГц поглощения в жидкой воде

В.Г. Артемов¹, А.А. Волков², А.А. Волков¹, Н.Н. Сысоев²

¹ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38

² Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1
vartemov@bk.ru

В исследованиях по воде в силу её жизненной важности задействован огромный арсенал экспериментальных и теоретических методов – структурных, тепловых, спектральных, расчетных [1]. Объем накопленного материала беспрецедентно велик. Для интерпретации экспериментальных данных разработано множество теоретических моделей, в основе которых, всех без исключения, лежит представление о воде как о собрании неделимых молекул H_2O , скрепленных водородными связями. Считается, что все богатство свойств воды обязано динамическим процессам в структуре водородных связей – их непрекращающимся разрывам и восстановлением [1- 3].

С годами сформировалась проблема, которую можно определить как конфликт между большим разнообразием свойств воды, наблюдаемых разными методами, и жесткостью её динамической структуры. Высокая степень условности принятых за базу понятий таких, как водородная связь или структурная релаксация, привели к разбросу представлений разных научных школ о происходящих в воде микроскопических процессах. Представления вынужденно сосуществуют, но в общую картину не складываются. Аксиома химии, например - повышенная подвижность протона в воде [4], мирится с фактом категорического отсутствия этого явления в диффузионных экспериментах с мечеными атомами [5]. По данным ЯМР [6] молекулы воды в масштабе пикосекундных времен обмениваются протонами, но время жизни молекулы воды при этом считается равным 10 часам [7]. Принят тезис о том, что молекулы воды, хотя и опутаны паутиной водородных связей, легко и массово переориентируются. Противоречий так много, что они составляют норму, а сама вода как жидкость, наоборот, считается аномальной.

Унификация представлений о воде требует выработки на базовом уровне более адекватной физической модели [8]. Перспективной нам представляется идея, происходящая из работ Френкеля [9]. Предполагается, что каждая из молекул воды совершает диффузию броуновского типа, задерживаясь на время в клетке из окружающих её соседей. Движение молекулы в клетке носит осцилляторный характер.

В настоящей работе мы обращаемся к френкелевской идее с целью найти общие закономерности молекулярной динамики воды, которые определяют форму её терагерцовых диэлектрических спектров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. Эйзенберг, В. Кауцман “Структура и свойства воды” Л.: Гидрометеиздат, 1975.
2. Г.Г. Маленков // Журнал структурной химии, 2006, Т. 47, 5-35.
3. D. Marx // Chem. Phys. Chem. 2006, V. 7, 1848 – 1870.
4. P. Atkins, J. de Paula “Physical Chemistry” W. H. Freeman & Company, NY, 2010.
5. M. Holz, S.R. Heil and A. Sacco // Phys. Chem. Chem. Phys., 2000, 2, 4740-4742.
6. S. Meiboom // J. Chem. Phys. 1961. V. 34. P. 375–388.
7. P.L. Geissler et. al. // Science. 2001. V. 291. P. 2121-2124.
8. V.P. Sokhan et. al. // PNAS USA, 2015; 112(20): 6341.
9. Я.И. Френкель “Кинетическая теория жидкостей” Л.: Наука, 1975.