ISSN 1991-346X

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

N E W S

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА СЕРИЯСЫ

♦

СЕРИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ

♦

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

6 (304)

ҚАРАША – ЖЕЛТОҚСАН 2015 ж.
НОЯБРЬ – ДЕКАБРЬ 2015 г.
NOVEMBER – DECEMBER 2015

1963 ЖЫЛДЫҢ ҚАҢТАР АЙЫНАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С ЯНВАРЯ 1963 ГОДА
PUBLISHED SINCE JANUARY 1963

ЖЫЛЫНА 6 РЕТ ШЫҒАДЫ
ВЫХОДИТ 6 РАЗ В ГОД
PUBLISHED 6 TIMES A YEAR

АЛМАТЫ, ҚР ҰҒА
АЛМАТЫ, НАН РК
ALMATY, NAS RK

Б а с р е д а к т о р

ҚР ҰҒА академигі,
Мұтанов Г. М.

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Әшімов А.А.**; техн. ғ.докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Байғұнчеков Ж.Ж.**; физ.-мат. ғ.докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Жұмаділдаев А.С.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Қалменов Т.Ш.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Мұқашев Б.Н.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Өтелбаев М.О.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Тәкібаев Н.Ж.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА академигі **Харин С.Н.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Әбішев М.Е.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Жантаев Ж.Ш.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Қалимолдаев М.Н.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Косов В.Н.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Мұсабаев Т.А.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Ойнаров Р.**; физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Рамазанов Т.С.** (бас редактордың орынбасары); физ.-мат. ғ. докторы, проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Темірбеков Н.М.;** физ.-мат. ғ. докторы**,** проф., ҚР ҰҒА корр. мүшесі **Өмірбаев У.У.**

Р е д а к ц и я к е ң е с і:

Украинаның ҰҒА академигі **И.Н. Вишневский** (Украина); Украинаның ҰҒА академигі **А.М. Ковалев** (Украина); Беларусь Республикасының ҰҒА академигі **А.А. Михалевич** (Беларусь); Әзірбайжан ҰҒА академигі **А. Пашаев** (Әзірбайжан); Молдова Республикасының ҰҒА академигі **И. Тигиняну** (Молдова); мед. ғ. докторы, проф. **Иозеф Банас** (Польша)

Г л а в н ы й р е д а к т о р

академик НАН РК
Г. М. Мутанов

Р е д а к ц и о н н а я к о л л е г и я:

доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **А.А. Ашимов**; доктор техн. наук, проф., академик НАН РК **Ж.Ж. Байгунчеков**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **А.С. Джумадильдаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **Т.Ш. Кальменов**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **Б.Н. Мукашев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **М.О. Отелбаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **Н.Ж. Такибаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., академик НАН РК **С.Н. Харин**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Е. Абишев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Ж.Ш. Жантаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **М.Н. Калимолдаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **В.Н. Косов**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Т.А. Мусабаев**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Р. Ойнаров**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Т.С. Рамазанов** (заместитель главного редактора): доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **Н.М. Темирбеков**; доктор физ.-мат. наук, проф., чл.-корр. НАН РК **У.У. Умирбаев**

Р е д а к ц и о н н ы й с о в е т:

академик НАН Украины **И.Н. Вишневский** (Украина); академик НАН Украины **А.М. Ковалев** (Украина); академик НАН Республики Беларусь **А.А. Михалевич** (Беларусь); академик НАН Азербайджанской Республики **А. Пашаев** (Азербайджан); академик НАН Республики Молдова **И. Тигиняну** (Молдова); д. мед. н., проф. **Иозеф Банас** (Польша)

«Известия НАН РК. Серия физико-математическая». ISSN 1991-346X
Собственник: РОО «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)
Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан **№5543-Ж**, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год.
Тираж: 300 экземпляров.

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
www:nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2015

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75.

E d i t o r i n c h i e f

G. M. Mutanov,
academician of NAS RK

Editorial board:

A.A. Ashimov, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **Zh.Zh. Baigunchekov**, dr. eng. sc., prof., academician of NAS RK; **A.S. Dzhumadildayev**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **T.S. Kalmenov**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **B.N. Mukhashev**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **M.O. Otelbayev**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **N.Zh. Takibayev**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **S.N. Kharin**, dr. phys-math. sc., prof., academician of NAS RK; **M.Ye. Abishev**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **Zh.Sh. Zhantayev**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **M.N. Kalimoldayev**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member. of NAS RK; **V.N. Kosov**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **T.A. Mussabayev**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **R. Oinarov**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **T.S. Ramazanov**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK (deputy editor); **N.M. Temirbekov**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK; **U.U. Umirbayev**, dr. phys-math. sc., prof., corr. member of NAS RK

E d i t o r i a l s t a f f:

I.N. Vishnievski, NAS Ukraine academician (Ukraine); **A.M. Kovalev**, NAS Ukraine academician (Ukraine); **A.A. Mikhalevich**, NAS Belarus academician (Belarus); **A. Pashayev**, NAS Azerbaijan academician (Azerbaijan); **I. Tighineanu**, NAS Moldova academician (Moldova); **Joseph Banas**, prof. (Poland).

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Physical-mathematical series.
ISSN 1991-346X
Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)
The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of information and archives of the Ministry of culture and information of the Republic of Kazakhstan N 5543-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year
Circulation: 300 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
www:nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2015

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

N E W S
OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES
ISSN 1991-346X
Volume 6, Number 304 (2015), 62 – 65

ON CLUSTER MODEL OF WATER UNDER NONEQUILIBRIUM CONDITIONS

K. K. Makesheva

Kazakh national research technical university after. K. I. Satpayev, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: mami_yep@yahoo.com

Keywords: molecular structure of liquid water, water cluster model, self-organization, entropy.

Abstract. The thermodynamic analysis of non-uniform structure of liquid water is given in the paper. New interpretation of water as an interactive system, which constantly organizes itself, is offered. The anomalous properties of water features, which are explained by its molecular structure. Cluster model provides the most complete explanation of the nonequilibrium state of the water.

УДК 546 – 12 (076)

О КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ ВОДЫ В НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ

К. К. Макешева

Казахский национальный исследовательский технический университет им. К. И. Сатпаева,
Алматы, Казахстан

Ключевые слова: молекулярная структура жидкой воды, кластерная модель воды, самоорганизация, энтропия.

Аннотация. В работе дан термодинамический анализ неоднородной структуры жидкой воды. Предлагается новая интерпретация воды как интерактивной системы, которая постоянно самоорганизуется. Рассматриваются аномальные особенности свойств воды, которые объясняются ее молекулярной структурой. Кластерная модель позволяет наиболее полно объяснить неравновесность состояния воды.

Экспериментальные и теоретические работы выделяют уникальную способность воды к структурообразованию и высокую чувствительность к внешним воздействиям. Практически все свойства воды аномальны, а многие не подчиняются характеру тех законов физики и химии, которые управляют другими веществами [1].

Первая особенность воды: теплоемкость аномально высока, отсюда вытекает удивительная возможность воды сохранять тепло.

Вторая особенность: вода – единственное вещество, для которого зависимость удельной теплоемкости от температуры имеет минимум около 37 °С.

Третья особенность: вода обладает высокой удельной теплотой плавления, то есть воду очень трудно заморозить, а лед растопить. Благодаря этому климат на Земле в целом стабилен.

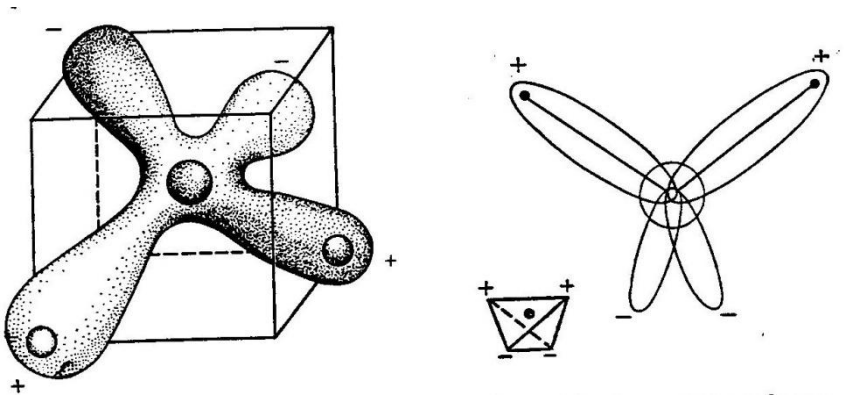
Четвертая особенность: максимальная плотность воды наблюдается при температуре 4 °С, а не при температуре замерзания 0 °С (талая вода). Необычное поведение плотности воды важно для поддержания жизни на Земле.

Пятая особенность воды: она сильнее других жидкостей растворяет любые вещества, если ей дать время. Именно из-за этой растворяющей способности никому до сих пор не удается получить химически чистую воду.

Шестая особенность: только в водной среде возникают гидрофобные взаимодействия, играющие большую роль в химических и биологических средах и в технологиях. (рождение α-структур у белков и нуклеиновых кислот). Сейчас активно исследуется феномен памяти воды. Нельзя ли использовать воду для хранения памяти? Битам и байтам могли бы соответствовать кластеры воды.

Таким образом, многие странные свойства воды, очевидно, обусловлены ее особой молекулярной структурой. Ее молекулы это диполи с отрицательным центром – атомом кислорода и двумя положительными центрами – атомами водорода (рисунок 1).

Рисунок 1 – Электронное облако и электронные орбитали молекулы воды



В жидкой воде эти диполи находятся в постоянном движении. Стоит им сблизиться, как между ними образуется водородный мостик (связь). Любая молекула воды может притянуть к себе четыре других. Так возникает целая сеть, структура из молекул.

Итак, молекулы обладают уникальным свойством объединяться в кластеры (группы) (H_2O) N, где N – число молекул (рисунок 2).

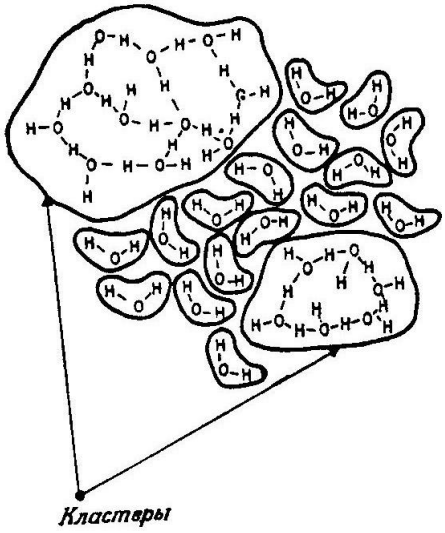


Рисунок 2 – Структура жидкой воды в модели мерцающих кластеров Фрэнка – Вина

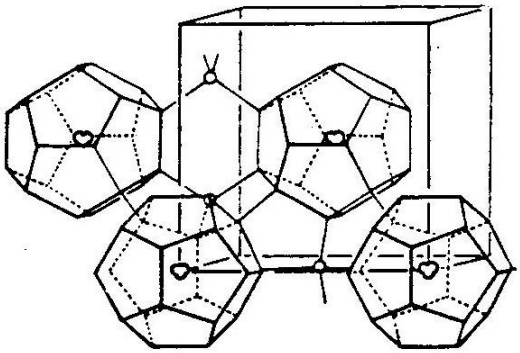


Рисунок 3 – Автоклатратная модель жидкой воды

Было предложено большое число моделей (Бернал, Фаулер, Полинг, Самойлов и т.д.). Эти модели можно условно разбить на три группы [2].

1) кластерные, предполагающие наличие в воде двух различающихся по свойствам микрофаз, по крайней мере в одной из них молекулы соединены водородными связями;

2) клатратные, постулирующие существование в воде непрерывного каркаса из молекул, соединенных водородными связями, содержащими пустоты, в которых располагаются дополнительно молекулы воды (рисунок 3);

3) континуальные, предполагающие существование непрерывного каркаса из молекул воды, которые соединены водородными связями, в каркасе не содержится участков другой фазы, отсутствуют пустотные молекулы. Общим для всех моделей является картина воды: молекулы образуют открытую динамическую пространственную сетку, в которой образуются кластеры (H_2O) N, которые могут рождаться, разрушаться.

Под кластером понимают группу молекул, объединенных водородными связями в единый ансамбль. Прямое наблюдение кластеров ограничено. При комнатной температуре степень ассоциации N для воды составляет от 3 до 6.

Таким образом, вода – сложная жидкость, составленная из повторяющихся групп, содержащих от 3 до N одинаковых групп (рисунок 4).

Именно поэтому вода имеет аномальное значение температуры плавления. По правилам температура должна быть не выше -100°С, на самом деле равна 0°С. Температура кипения воды должна быть -75°С, а фактически равна +100°С.

При испарении воды кластеры распадаются и превращаются в газ.

Все эти странные физические и химические свойства есть следствия структурной неоднородности воды. Жидкая вода представлена ансамблем мерцающих кластеров, состоящих из соединенных водородными связями молекул, плавающих в свободной воде. Важно отметить, что образование одной связи создает условия для возникновения новых связей и связь распространяет сама себя через соседние молекулы (эффект домино). Образование кластера является кооперативным процессом. Время жизни кластера порядка 10^{-10} С, что соответствует времени релаксационных процессов в воде, это время в 1000 раз больше периода молекулярных колебаний.

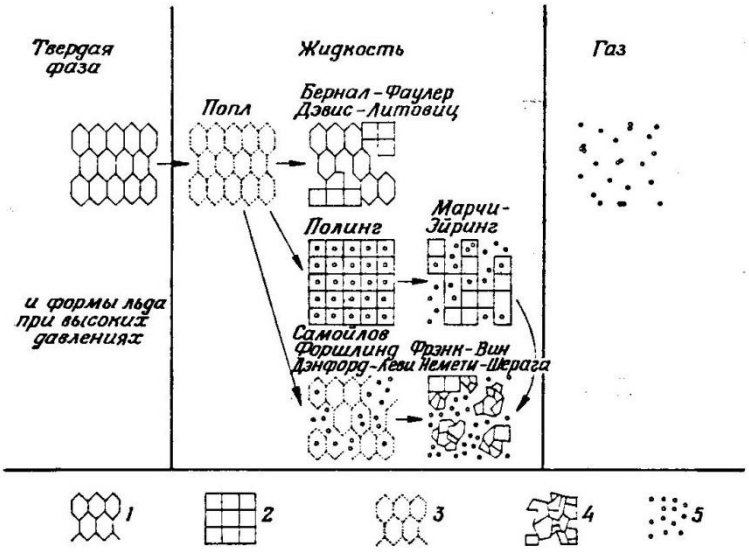


Рисунок 4 – Основные теории структуры воды:
1 – кристаллическая решетка льда-I; 2 – кристаллические решетки, отличающиеся от льда-I; 3 – искаженная или разрушенная решетка льда-I: 4 – беспорядочно связанные молекулы воды; 5 – мономерные молекулы воды

Если бы вода состояла из одних молекул и не было процесса образования и распада кластеров, то такое состояние было бы равновесным и характеризовалось бы максимумом энтропии и минимумом свободной энергии. Следовательно, структурные неоднородности в пространстве и во времени есть следствие неравновесности состояния воды, в котором энтропия имеет минимум, а свободная энергия максимум [3]. По расчетным данным Немети и Шерага с повышением температуры воды величина энтропии возрастает, а свободная энергия уменьшается. Увеличение температуры воды сопровождается разрывом водородных связей и распадом кластеров.

Резюмируя, можно отметить, что такая сложная по составу (ансамбль кластеров) интерактивная система постоянно самоорганизуется, стремясь достичь некоторого критического состояния, в котором малое событие (разрыв связи) может вызвать цепную реакцию, способную повлиять на любое число элементов системы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Хорн Р. Морская химия. – М.: Мир, 1972. – 400 с.

[2] Вода: структура, состояние, сольватация. Достижения последних лет / Под ред. А. М. Кутепова. – М.: Наука, 2003. – 404 с. (Серия «Проблемы химии растворов»).

[3] Макешева К.К., Канатчинов А.К. Структура воды как открытая система в неравновесных условиях // Материалы III Межд. конф. «Актуальные проблемы механики и машиностроения». – Алматы: КазНТУ им. К. И. Сатпаева, 2009. – Т. 3. – С. 256-259.

REFERENCES

[1] Horn R. Marine Chemistry. M.: Mir, 1972. 400 p. (in Russ.)

[2] Water: structure, state, solvation. Achievements in recent years. Ed. A. M. Kutepov. M.: Nauka, 2003. 404 p. (Series "Problems of Solution Chemistry") (in Russ.)

[3] Makesheva K.K., Kanatchinov A.K. The structure of water as an open system under nonequilibrium conditions. Proceedings of the III Intern. Conf. "Actual problems of mechanics and engineering". Almaty: KazNTU after K. I. Satpayev, 2009. Vol. 3. P. 256-259. (in Russ.)

ТЕПЕТЕҢДІКСІЗ ЖАҒДАЙЫНДА СУ КЛАСТЕРЛІК МОДЕЛІ ТУРАЛЫ

К. К. Макешева

Қ. И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

Тірек сөздер: молекуларлық сұйық су құрылымы, су кластерлік моделі, өзін-өзі ұйымдастыру, энтропиясы.

Аннотация. Жұмыста сұйық судың біртекті құрылымының термодинамикалық анализі берілген. Судың жаңа интерпретациясы әрқашан да өзінше ұйымдастырылатын интерактивті жүйе ретінде ұсылынады. Су қасиеттердің аномалдық ерекшеліктері қаралады, олардың молекуларлық құрылымы түсіндіріледі. Кластерлік моделі су тепетеңдіксіз жағдайды ең толық түсініктеме береді.

Поступила 03.11.2015 г.

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see http://www.elsevier.com/publishingethics and http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see http://www.elsevier.com/postingpolicy), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service http://www.elsevier.com/editors/plagdetect.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www:nauka-nanrk.kz

http://www.physics-mathematics.kz

Редактор *М. С. Ахметова*
Верстка на компьютере *Д. Н. Калкабековой*

Подписано в печать 10.11.2015.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
10,2 п.л. Тираж 300. Заказ 6.

Национальная академия наук РК
050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-18, 272-13-19