

## **ВОДА ОТ КАВЕНДИША И ЛАВУАЗЬЕ ДО НАШИХ ДНЕЙ**

Интерес к научному постижению природы воды существует давно. Связано это главным образом с огромным значением воды в жизни биосферы Земли и особенностями физических свойств, отличающими ее от других жидкостей. Одна из важнейших особенностей воды заключается в том, что плотность льда меньше чем плотность жидкой воды. Это приводит к тому, что в холодное время года поверхность водоемов покрывается слоем льда, в то время как нижние слои воды остаются жидкими, и в них сохраняется жизнь. В ряду гидридов VI группы элементов Менделеева, к которым она относится, температуры плавления и кипения воды почти на сто градусов выше ожидаемых. Кроме того было обнаружено, что плавление льда при приложении давления в две тысячи атмосфер понижается до  $-18^{\circ}\text{C}$ .

Начало систематическому исследованию воды было положено Кавендишем и Лавуазье, установившим в 1780 году, что вода состоит из кислорода и водорода. В последующие годы никаких существенных научных подходов к решению проблемы аномалий воды предпринято не было. И только в 1891 году выходит статья Рентгена "О строении жидкой воды", в которой делается первая попытка объяснить аномалии воды. Рентген высказал гипотезу, что жидкая вода представляет собой раствор льда в воде. В дальнейшем проходило накопление экспериментальных данных. В 1933 году была опубликована статья Бернала и Фаулера "Структура воды и ионных растворов", в которой обобщены имеющиеся экспериментальные данные и высказано предположение о льдоподобной структуре воды. Предположение оказалось чрезвычайно плодотворным и было развито многими советскими и зарубежными учеными. С этой даты следует отсчитывать современный этап развития учения о воде, который, в свою очередь, можно разделить на докомпьютерный и компьютерный (с семидесятых годов прошлого столетия) периоды.

Было предложено большое количество умозрительных моделей строения жидкой воды, которые можно классифицировать следующим образом:

1. Кластерные модели – суспензия обломков льда в более плотной жидкости;
2. Клатратные модели – вода представлена в виде клатратного гидрата с заполненными пустотами;

3. Континуальные модели – представляют собой существенно искаженную структуру льда или иного тетраэдрического каркаса.

В первой группе наиболее плодотворной была модель предложенная Немети и Шерага в 1962 году. Суть модели в том, что при плавлении лед распадается на кластеры льдоподобной структуры, которые окружены более плотной жидкостью. Это развитие идеи Рентгена. В дальнейшем была показана несостоятельность этой модели.

Ко второй группе относится модель Самойлова предложенная в 1946 году. Эта модель предполагает, что при плавлении часть каркасных молекул попадает в полости льдоподобной структуры увеличивая плотность воды, она достаточно удачно объясняет аномалию плотности и некоторые другие аномалии воды.

Родоначальником континуальных моделей следует считать Попла, который в 1951 году предположил, что при плавлении льда водородные связи не рвутся, а только изгибаются. В 1979-1981 годах Скитс и Райс разработали собственную концепцию модели непрерывной случайной сетки водородных связей в воде. Эта модель нашла подтверждение при компьютерном моделировании воды и водных систем.

Итоги докомпьютерного периода исследования воды подведены Эйзенбергом и Кауцманом в монографии "Структура и свойства воды" 1969 г. В русском переводе монография вышла в 1975 году. Авторы ввели понятия мгновенной  $I$ , колебательно-усредненной  $V$  и диффузионно-усредненной  $D$  структуры воды, которая проявляется в зависимости от времени наблюдения  $t$ :  $I$  – структура  $t_0 > t$ ;  $V$  – структура  $\tau_0 < t < \tau_{ж}$ ;  $D$  – структура:  $t > \tau_{ж}$ . Здесь  $\tau_0$  – период колебаний, а  $\tau_{ж}$  – время жизни частицы в положении равновесия.

Компьютерное моделирование чистой воды и водных систем проводилось двумя методами: Монте-Карло и молекулярной динамики. Наиболее информативным является метод молекулярной динамики т.к. дает сведения о структуре системы и о молекулярной подвижности. Первые работы были выполнены с малым количеством молекул воды. Рахман и Стиллинджер в 1971 году представили результаты моделирования 64 молекул воды методом молекулярной динамики. Успехи в развитии компьютерной техники позволяют в настоящее время моделировать системы с более чем 10000 частиц.