

Сборник тезисов докладов
третьей всероссийской конференции
Физика водных растворов

Содержание

- 5 Пленарный доклад И.А. Щербаков «Влияние внешних воздействий на свойства водных растворов»
- 6 И.В. Баймлер, А.В. Симакин, С.В. Гудков «Исследование влияния концентрации наночастиц Ni на лазерный пробой водных растворов»
- 7 И.В. Баймлер, А.В. Симакин, С.В. Гудков «Исследование влияния концентрации наночастиц Fe и Cu на динамику распределения наночастиц по размерам»
- 8 Л.В. Беловолова, М.В. Глушков «Особенности структуры и динамики воды в объеме и нанограниченных системах (обзор)»
- 9 В.А. Бродский, Ю.О. Малькова, В.А. Колесников «Влияние ζ -потенциала и размера дисперсной фазы малорастворимых соединений металлов на эффективность их совместного извлечения из концентрированных растворов электролитов методом электрофлотации в присутствии ПАВ»
- 10 В.И. Брусков, В.И. Емельяненко, А.В. Черников, А.М. Усачева, В.Е. Иванов «Образование в водной среде гидратированных электронов при тепловом электромагнитном воздействии»
- 11 П.Н. Болоцкова, Н.Ф. Бункин, М.С. Кирьянова, В.А. Козлов, Р.С. Сафроненков «Роль встряхивания жидкого образца в динамике набухания полимерной мембраны; кювета ограниченного объема»
- 12 П. С. Степанов, С. В. Степанов, В. М. Бяков
«Позитронная спектроскопия доказывает наноэмульсионный характер водных растворов одноатомных спиртов»
- 13 А.В. Шипкина, М.В. Венер «Гидратация иона диклофенака: экспериментально-расчетный поиск анионных пар»
- 14 В.Е. Асадчиков, Н.Ф. Бункин, В.В. Волков, Ю.О. Волков, А.Д. Нуждин, Б.С. Рошин, Н.Д. Стёпина, А.М. Тихонов «Влияние щелочного состава жидкой субфазы на морфологию ленгмюровских плёнок Нафiona»

- 43 **М.А. Кононов, В.И. Пустовой, В.В. Светиков** «Исследование водного раствора NaCl малой концентрации методом поверхностной плазмонной спектроскопии»
- 44 **И.Е. Стась** «Скорость диффузии ионов электролитов в воде, подвергшейся воздействию низкоинтенсивного электромагнитного поля ультравысоких частот»
- 45 **С.В. Степанов, В. М. Бяков, П.С. Степанов** «Позитроний в биосистемах и медицине»
- 46 **Е.Г. Тараканова, И.А. Кириленко** «Молекулярный механизм явления азеотропии в водных растворах муравьиной кислоты»
- 47 **В.А.Твердислов** «Хиральный дуализм как принципиальный фактор фолдинга в водно-белковых системах»
- 48 **Д.Л. Тытик** «Моделирование гидратных оболочек растворенных в воде нанопузырьков газов»
- 49 **С.А. Тарасов** «Основные свойства высокоразбавленных водных растворов: фундаментальное и прикладное значение»
- 50 **А.В. Уваров, Ю.Ю. Плаксина, Н.А. Винниченко** «Пространственные изменения концентраций примесей в воде при обдуве бассейна»
- 51 **В.Б. Хабаров, А.К. Буряк** «Сложные гидраты этанола обнаружены в водных растворах методом эксклюзивной высокоэффективной жидкостной хроматографии»
- 52 **Г.А. Ляхов, М.А. Шерменева, И.А. Щербаков** «Концентрация водородных связей - второй параметр порядка в фазовом переходе расслоения жидкого раствора»
- 53 **В.И. Шостка, Н.В.Шостка, В.И. Вершицкий, С.И. Халилов** «Исследование процессов формирования клатратных структур в приповерхностных слоях водно-спиртовых смесей»
- 54 **О.И. Яблонская, Е.В. Буравлева, К.Н. Новиков, В.Л. Воейков** «Биологическая активность и физико-химические свойства водных растворов гидратированного фуллерена C₆₀ в низких и сверхнизких концентрациях»
- 55 **Н.В. Яглова, С.С. Обернихин, Е.П. Тимохина, В.В. Яглов** «Гистофизиологические изменения в щитовидной железе, обусловленные потреблением воды с пониженным содержанием дейтерия»

Моделирование гидратных оболочек растворенных в воде нанопузырьков газов

Д.Л. Тытик

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119991 Москва, Ленинский проспект, 31
e-mail: dytik@yandex.ru*

Газовые нанопузырьки в водных растворах давно и успешно регистрируются с помощью приборов высокого разрешения [1,2]. В настоящее время наиболее разработанной теорией формирования нанопузырьков в водных растворах является модель бабстонов [3], связывающая их стабильность с адсорбцией ионов на межфазной границе вода-газ.

Рассмотрены структурные модели стабильных оболочек связанной воды морфологически подобные икосаэдру и полостям-многогранникам в водных клатратных каркасах (додекаэдр, многогранники Аллена). Обсуждена возможность применения структур связанной воды для моделирования строения межфазной области, микрогетерогенных свойств водных систем при растворении в воде атмосферных газов.

Используя молекулярное представление о строении объемной воды (модель сетки водородных связей [4] и упругой сетки водородных связей [5]), можно заключить, что газы диффундируют внутрь объема по системе дефектов сетки водородных связей. В процессе растворения газа в воде конкурируют два основных фактора – давление атмосферы на границе газ-вода, обуславливающее диффузию газов, и обратный процесс – выталкивание молекул газа из упругой сетки водородных связей (УСВС) из-за гидрофобного (сольвофобного) эффекта. Это, по-видимому, приводит к молекулярным процессам, формирующим некоторый оптимум, когда избыточное локальное напряжение в УСВС может компенсироваться слиянием, например, газогидратных оболочек и формированием более крупных полостей – нанопузырьков («стоки напряжений» в УСВС). Стабильность нанопузырьков, в основном, определяется постоянным действием градиента химического потенциала между фазой объемной воды (УСВС) и газовой фазой внутри пузырька. Действие этого фактора приводит к структурированию части молекул УСВС и формированию стабильной («напряженной») межфазной области (модель поверхностного слоя воды Н.А.Бульёнова [6]) с избыточной свободной энергией.

Состав квазиравновесной нанопузырьковой фазы в воде зависит от многих физико-химических параметров – давления атмосферы, температуры, *pH* раствора, механического воздействия (перемешивание/встряхивание) и ряда других. Если принять концентрацию нанопузырьков примерно 10^9 1/мл [7], а средний их размер 150 нм, то внутренняя поверхность нанопузырьков составит примерно 3000 см²/л. Таким образом, регулируя состав нанопузырьковой фазы, можно в определенной мере управлять, например, адсорбционными свойствами водных растворов.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-03-00696).

[1] Н.Ф. Бункин, О.И. Виноградова, А.И. Кузлин, А.В. Лобеев, Т.Г. Мовчан, К вопросу о наличии воздушных субмикропузырей в воде: эксперимент по малоугловому рассеянию нейтронов, Письма в ЖЭТФ, том 62 (8), стр. 659-662 (1995).

[2] Д.Л. Тытик, С.А. Бусев, В.В. Высоцкий, А.А. Ревина, О.В. Суворова, В.И. Кузьмин, А.Ф. Гадзаов, Эффект рассеяния ультрафиолетового излучения деионизованной водой, Журнал физической химии, том 93, № 12, стр. 1865–1869, (2019).

[3] Н.Ф. Бункин, Ф.В. Бункин, Бабстонная структура воды и водных растворов электролитов, УФН, том 186, №9, стр.933-952, (2016).

[4] A. Geiger, H.E. Stanley, Tests of universality of percolation exponents for a three-dimensional continuum system of interacting waterlike particles, Physical Review Letters vol. 49(26), p.1895–1898, (1982).

[5] M. Rodnikova, J. Barthel, Elasticity of the spatial network of hydrogen bonds in liquids and solutions, Journal of Molecular Liquids, vol. 131–132, p. 121–123, (2007).

[6] Н.А. Бульёнов, Е.А. Желиговская, Функциональная модульная динамическая модель поверхностного слоя воды, Журнал физической химии, том 80, № 10, стр. 1784–1805, (2006).

[7] T. Fujita, The status and future of fine bubble generation, measurements and applications, 7th International Symposium of Fine Bubble Technology, Sydney, Australia, July 25, 2016, (2016).