

ÓÄÊ 544.1:544.2:54:51:54:681.3

*N.À. Aâçí iñþê, A.À. I' áðâæíâeí, E.Â. Óí i èí à
Êí i üþòåðí í å i í äåëèðí âàí èå çàõâàòà i ðí òí í à,
i í eäåéóë áî äî ðí äà è i áðàí à á eëåðòí ÷ í ûõ
i óëüðèñòðóëðàõ áî äú è àí i ðôí í áî eüää*

Ââââââí èâ. Â óñéê áeýþo áúñðoðí áí í áðâáâí í áâñð-
í áí áí áðâææââí èý í ðè O < 133E áí áâá áðâçóðo
ñðâééí áðâçí Úâ Ôàçû [1], éí óí ðûâ í ðââñðââæý-
þþo èí ðâðâñ áæý mî çââí èý í áðâðoðí ûðo í áéí iððâ-
éâé áí áí ðí áí ûðo óí iððâ ÑÍ₄, Í₂. T ðè èçí áí áí èè
âââæâí èý èéè ðâí í áðâðoðoðû á áí í ððí í í èüââ
í ðí èññði áyðo ñðâ=éé í iððâ ðâí áðâðoðoðû á áí
í ðââæâí èóði èé [2] è ðâðí í í èââí é æéí áí èéè
[3] í áí è í ðââæâí æââí á áââðü ðâñ÷ðâ áéâðoðí ðí áí
í ðéüððâðoðoðoðí áí ñððí áí èý áí áú è áí í ððí í -
áí èüââ, èçó+áí Ú í ñí áâí í í ñððe yí áðâðoð=âññéëð
ââððuâðí á ððâí ñí í ððâ á èéâðoðí ðí ûðo í ðéüððâðoðoðoð-
ðoðâðo áí áú èâðoðí í áí Í₃ Í₁, Í₅ Í₂ + è yñðâðoðoðí í áí
í áðâðí í ñðði í ðí ðí ðí áí à Í₁, í ðâðâñðââæâí Ú ðâçóðéüðâ-
ðoðû ðâñ÷ðâ áéâðoð=âññéëð áâððuâðí á çâðââðoðâ
í í èâðoðé ÑÍ₄ è Í₂ á èéâðoðí ðí ûðo í ðéüððâðoðoðoð-
ðoðâ áí í ððí í áí èüââ.

$$G(a, b, g) = U(a, b, g) - t \bullet S(a, b, g) + p\Omega(a, b, g), \quad (1)$$

Çàì áòèì òàéæå, ÷òî
 $t = kt, S = ks$,
 åää k – i ñòî ýí í àÿ Áî èüöì àí à.
 Ni ðääääëèåâ ðääååí ñòåâ :
 $da + db + dg = dn$, (2)
 åää n – i áùåå êî èè ÷ ñòåâ :
 Ä i áðí i i i ðääëæåí èè áûðäæåí èå äëÿ áî óò-
 ðäí í áé ýí áðäèè çäi èòåðöñ ñääöþùèì áðäçî :
 $U(a, b, g) = N_{H_2O} e_{H_2O} + ae_a + be_b + ge_g$, (3)
 åää e_{H_2O} – ýí áðäèÿ ìòääéüí íé i íéåéóëü áî áü;
 e_a, e_b, e_g – ýí áðäèè ñí i ñääöþùèò ñäýçè. Äûðäæåí èå äëÿ ýí òðí i èè èì áåò áèä:
 $s(a, b, g) = \ln \frac{n!}{a! b! g!}$. (4)

Î áúâì áî ãú ï ðääñòåâèì á àääèòèáí î áéäå:
 $\Omega(a, b, g) = N_{H_2O} \Omega_{H_2O} + a\Omega_a + b\Omega_b + g\Omega_g$, (5)

âäå Ω_{H_2O} – î áúâì î ðääñëüí î é î èäéóëü áî äú;
 Ω_a , Ω_b , Ω_g – ýôôåêòèáí ûâ î áúâì ú ñí ñòåò-
 ñòåòþùéò ðëí î ñäýçé.

Í ðë ò÷åðå ðí ëüéí α- è β -ñäýçåé àëÿ ðääí î áåñ-
 í úô äî èäååûô ååëè÷èí èí åâí :

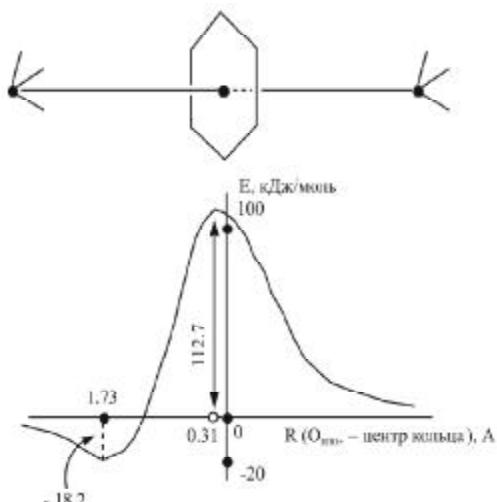
$$n_a = \frac{1}{\frac{(E_a - E_b) + p(V_a - V_b)}{RT}},$$

$$n_b = \frac{1}{\frac{(E_b - E_a) + p(V_b - V_a)}{RT}}, \quad (6)$$

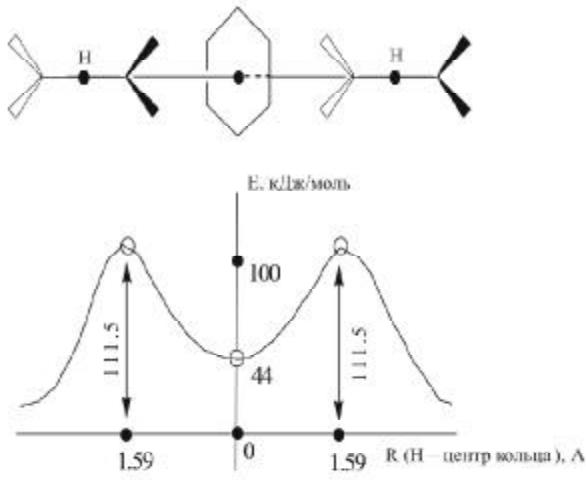
OÈI ÈB

èì ́ ì äéñòåèé, í ́ æç í ́ öái èòù ñðåäí èå ðàçì åðû L ñóí åðí ́ èåéöé (í₂í₁)_n á áî äå:

$$L = \frac{R_a^3 n_a}{R_b^2 n_b} \quad (7)$$



Đèn. 1. Ī ūoái öëàëüí ày êðëèâäy ī ðî ôí æääái èy
 èí í à ī ₃ + ÷âðâç Ôðàäí áí ò (ī ₁ ī ₆)

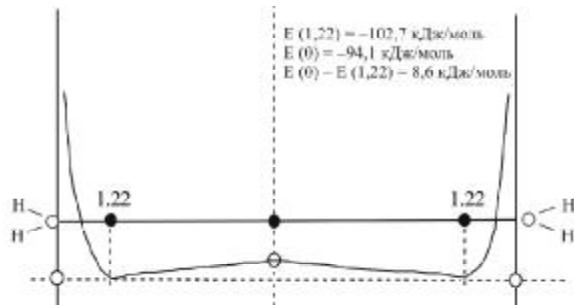
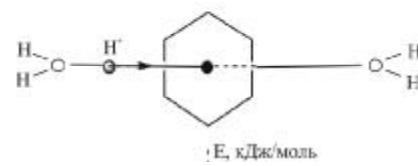


Đèñ. 2. $\tilde{I} \dot{I} \ddot{o}_1 \ddot{o}_2 \ddot{e}_3 \ddot{e}_4 \ddot{u}_5 \ddot{y}_6$ $\dot{e}_7 \ddot{e}_8 \ddot{e}_9 \ddot{e}_10 \ddot{e}_11 \ddot{e}_12 \ddot{e}_13 \ddot{e}_14 \ddot{e}_15 \ddot{e}_16$

Â ñeo÷àå i åððaí ñà i ði ði ði à á ði ði à í ³ i +
 ÷åðåç öeëëëë÷åñëëëé ððaai ái ò èi åái åùñi éëëé
 åáðüåð (130 êÄæ/ i 1ëü). Â ñeo÷àå i åððaí ñà i ði -
 ði í à á ði ði à í ⁵ i + ÷åðåç öeëëëë÷åñëëëé ððaai ái ò
 èi åái åää åáðüåðå: åùñi éëëé áí åðí éë (111 êÄæ/
 i 1ëü) è i ècëëëé áí ððaai í éë (67 êÄæ/ i 1ëü). Â i åð-
 åí ñeo÷àå ááðüåð ñäýçáí n ñëëàì è i ððaëëëåå-
 í èÿ èi í à í ³ i + i ò èi ëüöa i ðe i i i ïðéå i ði éòë
 ÷åðåç í åái. Â i åðí ði i ñeo÷àå i äëí åáðüåð ñäýçáí
 n ñëëàì è i ððaëëëååí èÿ, à åðoåí é - n ñëëàì è i ðe-
 oÿæáí èÿ i ði ði i à é i i àí èeñéi ði åá.

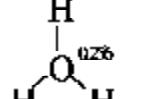
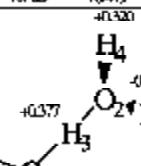
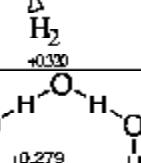
Í à ðeññóí éâ 3 i ï êäçáí yí áðååðø÷åññéé áàðüåð
i ði ôí æääái èy í + ÷åðåç êí èüööí (í , í).

Áūnī òa yí áððåáðò-áñéi áí áaðüúáðá áéyí l + níñòááð-
éyáð áñááí 9 éAæ/i í ééü. Nééi áí é ááðüúáð óðááí n-
í ðóða í ðí ðí ì à l + áððåç öèééè-áñééè óðááí áí ò
(l, l, l) áí óðéé ñói áðí í ééáéóé áí äú (l, l, l)_n í à i i-
ðýäí è í áí üðá, -÷áí ó l, l, l + , l, l + . Yðí è í ááñí á-é-
ááðó ýóðááðééáí úé yñòáðáðí úé í áðááí èçí í áðá-
í níñòááðéí l, l, l, l.

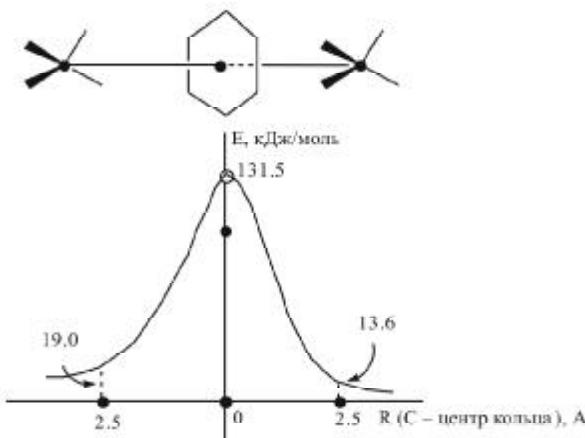


Đèñ. 3. Ī ī òáí öèäëüí àÿ èðèäàÿ í ðî õî æääí èÿ í +
÷åðâç ôðàäí áí ò (Í 6 Í 6)

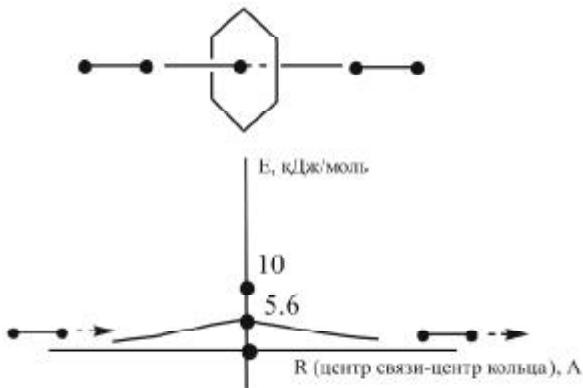
Åâæè÷èí û ðæññ÷èòàí í ûô ì àðàì åòðî â èí í å
è ñóíì åðî î èåêéöë âî äü

Ионная система	Параметр	Величина
	$L(O-H), \text{\AA}$	0,99
	$\alpha(H-O-H), \text{град}$	113,8
	$L(O_1-O_2), \text{\AA}$	0,98
	$L(O_1-H_1), \text{\AA}$	1,16
	$\alpha(H_1-O_2-H_2), \text{град}$	107,5
	$\alpha(H_1-O_2-H_3), \text{град}$	116,5
	$\alpha(O_1-H_3-O_2), \text{град}$	178,7
	$L(O_1-H_1), \text{\AA}$	1,03
	$L(O_2-H_2), \text{\AA}$	1,80
	$\alpha(H_1-O_1-H_2), \text{град}$	117,9
	$\alpha(O_1-H_1-O_2), \text{град}$	177,8

Í éáí áí èá í í éáéóé ÑÍ₄, í₂² Ó÷èòúáàÿ ñòðää-
í èå ðäçì áððü í óëüöè÷àñòëò (í₂₁)_n è äëeí û áí òo-
ðèí í éáéóéÿðí ûò è í áæí í éáéóéÿðí ûò áí áí ðí á-
í ûò ñäÿçáé, í áæí í òáí èòù ñëà÷í è í èí õí í ñòè í ðè-
í áððåõí áá í áæó ðûñöëí è è í èí õí í è àí í ðòí ûí è
Óàçàí è. Í áá ñòðåééí í áðäçí úá Óàçù èüää í áðí áÿö-
ñý á í áðåááí í áâñí í í ñí ñòí ýí èé. Ýòé Óàçù í ðè èç-
í áí áí èé áàâééí èÿ èéé òåí í áðòåòòðû ñëà÷í èí í
í áððåõí áÿö áððå á áððåááí ñ í ðí òáí õí ûí èçí áí áí è-
áí í èí õí í ñòè (í áúâí à Óàçù Ø):



Đèñ. 4. Ī ūoáí öeàëüí àÿ êðèâaÿ ī ðî õí æääáí èÿ ÑÍ
÷âðåç Ôðàäí áí ò (Í, Í, Í)



Đèñ. 5. Ī ūoáí òeäeüí ày êðeâay i ðí õi aeäáí èy ī
÷åðåç ôðaâí áí ò (ī 6 6)

$$w(\%) = \frac{\Omega_1 - \Omega_2}{\Omega_1} \cdot 100\% = \left(1 - \frac{\Omega_2}{\Omega_1}\right) \cdot 100\%, \quad (8)$$

$$\Omega_1 = n_a^1 \Omega_a + n_b^1 \Omega_b; \quad \Omega_2 = n_a^2 \Omega_a + n_b^2 \Omega_b.$$

Í ñáñòåâéÿý í ñéó÷áí í Úå çí à÷áí èý, í ñéó÷èí : $w(\%) = 15\%$, ÷òí ñí åëæñóåòñý ñ ýéñí åðèí áí ñí (20%) [1].

1. Mishima O., Stanley E. The Relationship between liquid, supercooled and glassy water // Nature. 1998. Vol. 396. P. 329–335.
 2. Beznosovuk S.A. Modern quantum theory and

computer simulation in nanotechnologies: quantum topology approaches to kinematical and dynamical structures of self-assembling processes. Materials Science & Engineering C 2002;19 (1-2):369-372

3. Umezawa H., Matsumoto H., Tachiki M. Thermo field dynamics and condensed states. Amsterdam; New-York; Oxford, 1982.
4. Åâçí î ñþê Ñ.À., Ôîì èí à Ë.À. Í ðääéèðî ááí èå ñòðî - áí èý í áí ñéî í è÷åñêèö áéâàéî í í éåéñí á èðèäèÿ è í á- öðí èçí í á yéâéòðî õðèí è÷åñéî é í áðåáí ðéè ñóéúðåí áð- í í áí èðèäéååí áí yéâéòðî ééðà // Ááñðí èé ÕÃÓ: Áþë- éåðåí ú í í áðåðéåí í é è í áó-í í é èí Òðí ðí áöèè. 2003. 1 11 Ñ. 23–42.