

## Связь явлений переноса с характеристиками кластерной структуры воды

© А.В. Полянская,<sup>2</sup> А.М. Полянский,<sup>1</sup> В.А. Полянский<sup>3</sup>

<sup>1</sup> ООО „НПК электронные и пучковые технологии“,  
198188 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
195251 Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
199178 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: ampol@electronbeamtech.com

Поступило в Редакцию 15 января 2018 г.

В окончательной редакции 25 декабря 2018 г.

Принято к публикации 29 декабря 2018 г.

С помощью статистического подхода сделаны оценки размера кластеров воды и числа свободных молекул, участвующих в явлениях переноса. На базе экспериментальных данных по температурной зависимости вязкости и плотности воды определены размеры кластеров и число молекул в них, количество свободных молекул воды и длины их свободного пробега. Сделан вывод о том, что температура 36.6°C является особой точкой в диапазоне 0–100°C. При температурах выше этого значения происходит скачкообразное уменьшение энергии связи молекулы с кластером и резкое возрастание концентрации свободных молекул. Количественные данные сравнены с параметрами сверхпластичного состояния титана. Рассмотрен обмен веществ на примере функционирования эритроцитов крови в организме взрослого человека.

DOI: 10.21883/JTF.2019.06.47647.367-18

### Введение

Новые научные приоритеты в материаловедении, приборостроении, энергетике и науке о человеке связаны с размерностью структур от десятых долей до десятков нанометров. Около 100 лет тому назад при исследовании каталитической активности платины, имеющей поликристаллическую структуру, был установлен оптимальный размер ее кристаллов, равный 40–50 Å, при котором каталитическая активность становится максимальной [1]. Исследования были выполнены с использованием дифракции рентгеновских лучей.

В. Стюарт [2] применил метод дифракции рентгеновских лучей к исследованию структуры ряда жидкостей. Было обнаружено сходство между рентгенограммами мелкокристаллических тел и ряда жидкостей. Я.И. Френкель в своей монографии [3] обобщил экспериментальные данные, предложив новую интерпретацию характера теплового движения частиц в жидкостях. Согласно [3], основная часть атомов находится в „оседлых состояниях“, в которых атом совершает колебательное движение. Время жизни частицы в таком состоянии существенно больше, чем период колебаний атомов в твердом теле, составляющий порядка  $10^{-13}$  с. Затем атом покидает свое „оседлое состояние“ и оказывается в ближайшем „оседлом состоянии“.

Таким образом, явления переноса в жидкостях определяются тепловым движением свободных атомов между „оседлыми состояниями“. Диффузия, теплопроводность и вязкое трение определяются средней длиной свобод-

ного пробега атомов жидкости. Этот подход последовательно применялся разными авторами для описания явлений диффузии и теплопроводности в жидкостях.

Вода обладает уникальными свойствами. В 1891 г. В. Рентген впервые предложил рассматривать ее как двухкомпонентную жидкость [4]. В последних работах, опубликованных на эту тему [5–15], для изучения свойств воды использованы самые современные методы физических исследований. Тонкие эксперименты по определению электрических и магнитных свойств кластеров, объединяющих молекулы воды, позволили определить количественный состав кластеров: от 3 до 50 молекул воды в каждом. В этом же диапазоне по числу молекул находятся результаты теоретических исследований с использованием методов молекулярной динамики [14]. Малоугловое рассеяние излучения лазера привело к обнаружению „макрокластеров“, радиус которых составляет от 0.5 до 6  $\mu\text{m}$  [12,13]. Природа таких неоднородностей до конца не выяснена. По мнению одних авторов — это кластеры, образованные молекулами воды, по мнению других — стабильные микропузырьки растворенных газов (бабстоны).

Влияние кластерной наноструктуры воды на явления переноса ионов и их химическую активность исследовалось в [16–19]. Авторами получены оценки частот колебательных степеней свободы кластеров воды, содержащих ионы солей с различным количеством молекул воды. Эти частоты сравниваются с экспериментальными линиями ИК-спектров. На основании сопоставлений сделан вывод о зависимости кластерной структуры от

химической формулы растворенной соли. Речь идет о кластерах, в составе которых содержится не более 10 молекул воды.

С использованием различных физических методов, включая электронную микроскопию водных пленок при низких температурах, в [20] исследована кластерная структура воды на смачиваемой поверхности твердого тела.

Моделирование кластерной структуры воды методами молекулярной динамики выполнено в работе [21]. Основой причиной образования кластеров считается водородная связь между молекулами. С использованием уравнений молекулярной динамики рассчитывается устойчивость кластеров с количеством молекул от двух до шести.

Не смотря на большой интерес к структуре воды и водных растворов, до сих пор особенности строения воды не имеют единого описания в рамках кинетической теории.

## Оценка длины свободного пробега молекул воды

Согласно классической теории явлений переноса [22,23], длина свободного пробега обратно пропорциональна сечению столкновения атома с „оседлыми состояниями“ и концентрации этих состояний.

Конкретизируем задачу. Пусть „оседлое состояние“ представляет собой некую ассоциацию атомов или молекул жидкости, назовем ее кластером радиуса  $r_0$ . При размере кластера в несколько десятков Å, как было установлено в [2], он будет содержать тысячи атомов. Следовательно, подвижность кластера будет чрезвычайно мала по сравнению с подвижностью отдельных атомов или молекул, и вкладом кластеров в явления переноса можно пренебречь. Такой подход является универсальным для любых жидкостей, в том числе и для воды [3,24].

Перенос импульса в жидкости определяется коэффициентом вязкости  $\mu$ :

$$\mu = \frac{1}{3} v \cdot \rho \cdot \lambda, \quad (1)$$

где  $v$  — средняя скорость хаотического теплового движения молекул воды при данной температуре  $T$ ,  $\rho$  — плотность воды,  $\lambda$  — средняя длина свободного пробега молекул воды.

Длина свободного пробега обратно пропорциональна величине  $\sigma$  — сечения столкновения молекулы с кластером радиуса  $r_0$  — и концентрации кластеров  $n_{cl}$ .

Схема взаимодействия молекулы воды с кластером радиуса  $r_0$  приведена на рис. 1.

Можно предположить, что при температуре  $T = 0$  К все молекулы воды находятся внутри кластеров.

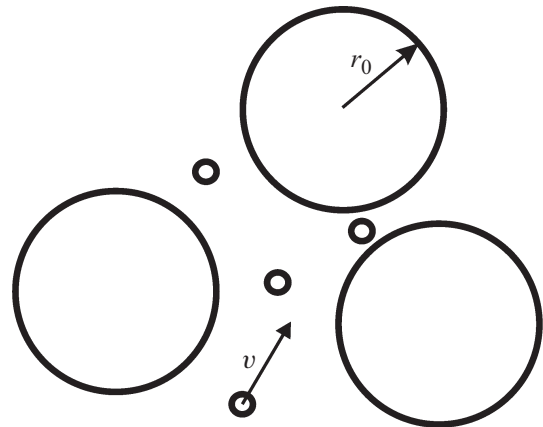


Рис. 1. Модель столкновения молекулы воды с кластером радиуса  $r_0$ ,  $v$  — средняя скорость теплового движения молекулы воды.

По определению средняя концентрация молекул  $n$  связана с плотностью материала  $\rho$  соотношением

$$n = \frac{\rho}{m_0} = \frac{\rho}{M} \cdot N_A, \quad (2)$$

где  $m_0$  — масса молекулы,  $M$  — масса 1 грамм-моля вещества,  $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$  — число Авогадро. Подставляя значения  $\rho$ ,  $M$  и  $N_A$ , получим  $n = 3.344 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

Средние расстояния  $d$  между молекулами воды в [см] определяются формулой

$$d = \sqrt[3]{\frac{1}{n}} = \sqrt[3]{\frac{M}{\rho \cdot N_A}}. \quad (3)$$

Среднее расстояние между молекулами при температурах, близких к  $4^\circ\text{C}$ , после подстановки численных значений в формулу (3), будет равно  $d = 0.31028 \cdot 10^{-7} \text{ см}$ .

Число молекул воды  $N_0$  в кластере радиуса  $r_0$  определяется отношением объема кластера к объему  $d^3$ , приходящемуся на 1 молекулу в кластере:

$$N_0 = \frac{4}{3} \pi \cdot \frac{r_0^3}{d^3}. \quad (4)$$

Концентрация кластеров  $n_{cl}$ , при условии, что их размеры примерно одинаковы и все молекулы заселяют их равномерно, будет равна

$$n_{cl} = \frac{n}{N_0} = \frac{3 \cdot n \cdot d^3}{4\pi \cdot r_0^3}. \quad (5)$$

Если объем, приходящийся на 1 молекулу, равен  $d^3$ , а концентрация молекул воды равна  $n$ , то справедливо соотношение  $n \cdot d^3 = 1$ . С учетом этого соотношения  $n_{cl}$  будет равно

$$n_{cl} = \frac{3}{4\pi \cdot r_0^3}. \quad (6)$$

При температуре, отличной от абсолютного нуля, подавляющая часть молекул воды будет сосредоточена

**Таблица 1.** Радиус кластера и длина свободного пробега молекул воды с учетом ее кластерной структуры при трех различных температурах

$T, ^\circ\text{C}$	$r_0, \text{Å}$	$\lambda, \text{Å}$
0	90.6	78.0
36.6	31.8	21.6
100	12.2	6.60

в кластерах, поэтому с некоторой погрешностью можно считать, что выполняются все зависимости, полученные выше.

Согласно [22,23], средняя длина свободного пробега молекул воды равна

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma \cdot n_{cl}}, \quad (7)$$

где  $\sigma$  — эффективное сечение столкновения, определяемое радиусом кластера  $r_0$  и радиусом молекулы воды  $r$ :

$$\sigma = \pi(r_0 + r)^2.$$

Учитывая малость размера молекулы  $r$  по сравнению с размером кластерной структуры  $r_0$ , получим

$$\sigma \cong \pi r_0^2 \cdot \left(1 + 2\frac{r}{r_0} + \frac{r^2}{r_0^2}\right). \quad (8)$$

Последним слагаемым в формуле можно пренебречь, как квадратом малой величины. Средняя длина свободного пробега молекулы воды будет равна

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi r_0^2 \cdot \left(1 + 2\frac{r}{r_0}\right) \cdot n_{cl}}. \quad (9)$$

Подставим в полученное выражение значение концентрации кластерных структур (6):

$$\lambda = \frac{4}{3\sqrt{2}} \cdot \frac{r_0}{\left(1 + 2\frac{r}{r_0}\right)} = 0.94281 \cdot \frac{r_0}{1 + 2\frac{r}{r_0}}. \quad (10)$$

Полученное значение длины свободного пробега (10) подставим в формулу (1), определяющую значение коэффициента вязкости:

$$\mu = 0.31427 \cdot \nu \cdot \rho \cdot \frac{r_0}{1 + 2\frac{r}{r_0}}.$$

С учетом малости отношения  $\frac{r}{r_0} \ll 1$  [1,2] можно получить оценку для радиуса кластера  $r_0$ :

$$r_0 = 3.182 \cdot \frac{\mu}{\nu \cdot \rho}, \quad (11)$$

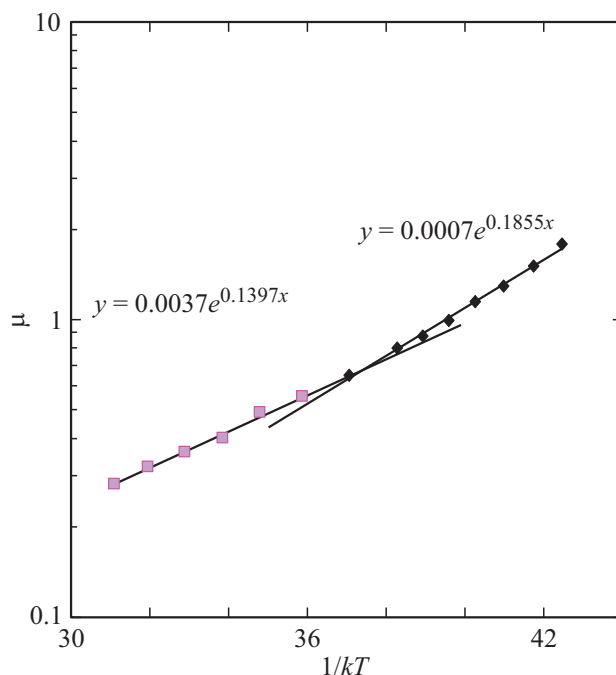
где параметры жидкости — средняя скорость теплового движения молекул  $\nu = \nu(T)$ , кинематическая вязкость  $\mu = \mu(T)$ , и плотность  $\rho = \rho(T)$  зависят от температуры.

**Таблица 2.** Результаты оценки среднего числа молекул в кластере  $N_0$ , числа свободных молекул на каждый кластер  $N_{\text{H}_2\text{O}}$  и времени „оседлой жизни“  $\tau$  для нескольких температурных точек

$T, ^\circ\text{C}$	$r_0, \text{Å}$	$E, \text{eV}$	$N_0$	$N_{\text{H}_2\text{O}}$	$\tau, \text{s}$
0	90.6	0.22	$10^5$	10.4	$3.9 \cdot 10^{-10}$
< 36.6	31.8	0.22	$4.5 \cdot 10^3$	1.2	$3.9 \cdot 10^{-10}$
> 36.6	31.8	0.135	$4.5 \cdot 10^3$	28.7	$1.6 \cdot 10^{-11}$
100	12.2	0.135	$2.5 \cdot 10^2$	4.60	$1.6 \cdot 10^{-11}$

В табл. 1 приведены значения величины средней длины свободного пробега молекул воды  $\lambda$  и радиуса кластера  $r_0$  для трех температурных точек: 0, 36.6 и  $100^\circ\text{C}$ . Вычисления выполнены по формуле (10) с использованием значений  $r_0$ , полученных по формуле (11). Значения  $\mu(T)$  и  $\rho(T)$  взяты из экспериментальных данных [25]. В диапазоне температур от 0 до  $100^\circ\text{C}$   $\mu(T)$  принимают значения от 1.8 до  $0.28 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ .

Среднее значение расстояния между молекулами воды (жидкое состояние) при нормальных условиях  $d = 3.1038 \text{ Å}$ . Таким образом, средняя длина свободного пробега молекул  $\text{H}_2\text{O}$  становится соизмеримой со средним расстоянием между молекулами только при температуре кипения. В диапазоне температур  $0-100^\circ\text{C}$  отношение  $\lambda/d$  за счет кластерной структуры воды варьирует от 25.0 до  $\sim 2.0$  соответственно.



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента вязкости  $\mu$  от  $1/kT$  в логарифмическом масштабе. Точками изображены данные [25], сплошной линией — результат линейной аппроксимации.

## Оценка числа свободных молекул воды

Зависимость коэффициента вязкости от температуры носит активационный характер [3] и может быть представлена в виде

$$\mu = \mu_0 \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (12)$$

где  $E$  — энергия связи молекулы с кластером в „оседлом“ состоянии („энергия активации“ молекулы в „оседлом“ состоянии по Я.И. Френкелю [3]).

График зависимости логарифма коэффициента вязкости  $\mu$  от  $1/kT$  представлен на рис. 2.

Зависимость для воды можно аппроксимировать двумя прямыми, угол наклона которых определяет энергию связи молекулы воды с кластером. Таким образом, для воды при нормальных условиях, энергия связи имеет два значения:

\* $E_1 = 0.22$  eV в диапазоне температур от 0 до  $36.6^\circ\text{C}$ ,

\* $E_2 = 0.13$  eV при температурах от  $36.6$  до  $100^\circ\text{C}$ .

Точка пересечения двух прямых на графике, представленном на рис. 2, соответствует температуре воды  $36.6^\circ\text{C}$ . Температура  $36.6^\circ\text{C}$  является фундаментальной характеристикой воды. При этой температуре энергия связи молекулы воды с кластером скачком уменьшается почти в 2 раза. В этой связи почти на порядок сокращается время жизни молекулы воды в кластере, почти в 20 раз возрастает доля молекул, покидающих кластер в каждую секунду. Таким образом, суммарная подвижность молекул воды при температуре  $t \geq 36.6^\circ\text{C}$  возрастает в сотни раз. Возможно, в этом кроется фундаментальное объяснение функционирования организма человека в рамках представлений о сочетании кластерной и молекулярной структуры воды во всем диапазоне температур от 0 до  $100^\circ\text{C}$ .

В табл. 2 приведены оценки среднего числа молекул в кластере  $N_0$ , числа свободных молекул на каждый кластер  $N_{\text{H}_2\text{O}}$  и времени „оседлой жизни“  $\tau$  для нескольких температурных точек.

## Обсуждение результатов

В пользу кластерной модели структуры воды говорит недавнее открытие димеров (образование из 2 молекул воды) в атмосфере [9].

Соотношение (11) получено благодаря использованию гипотезы о том, что кластеры (или кристаллиты) при течении жидкости являются твердыми образованиями, а скольжение их друг относительно друга обеспечивается прослойкой свободных молекул воды, характеристики которых ( $\nu$  и  $\lambda$ ) содержатся в классической формуле (1). Часть молекул воды находится внутри кластеров, часть — в виде отдельных молекул. Связь молекул с кластером велика ( $0.22$  eV в диапазоне температур  $0-36.6^\circ\text{C}$  и  $0.135$  eV в диапазоне температур  $36.6-100^\circ\text{C}$ ) и почти на порядок превышает среднюю

кинетическую энергию теплового движения молекул при нормальных условиях. Таким образом, предположение Рентгена [4] о двухкомпонентной структуре воды получает свое подтверждение. Явление сверхпластичности ряда металлов так же описывается именно с помощью гипотезы о существовании двухкомпонентной структуры [26].

Размеры кластеров в диапазоне температур  $0-100^\circ\text{C}$  варьируют в 7.43 раза от 9.06 до 1.22 nm. В связи с этим результаты малоуглового рассеяния излучения лазера оптического диапазона [11–13], где размеры неоднородностей структуры воды оцениваются от 0.3 до  $6.0 \mu\text{m}$ , нужно интерпретировать как стабильные пузырьки растворенного газа (бабстоны).

Доля свободных молекул воды в диапазоне температур  $0-100^\circ\text{C}$  возрастает в 177 раз от значения 0.0104 до 1.84% соответственно. При температуре  $\geq 36.6^\circ\text{C}$  доля свободных молекул скачком возрастает в 24 раза от 0.027 до 0.64%. Таким образом, в диапазоне температур, характерных для живых организмов, доля свободных молекул не превышает 1%. Вместе с тем, согласно данным [6], в составе так называемых ассоциатов (кластеров) находится 70% молекул воды и 30% в свободном состоянии. Аналогичные данные приведены в работе [8]. Полученные противоречия требуют дополнительных исследований.

На первый взгляд кажется, что количество свободных молекул воды слишком незначительно для ее течения. Вместе с тем процесс образования сверхпластичности титана при насыщении его водородом [27] также объясняется наличием „свободных нанокластеров“. Оказывается, что при объемной концентрации водорода 10%, титан и его сплавы, имеющие поликристаллическую структуру, превращаются в квазижидкость, причем исследования с помощью электронного микроскопа показывают, что при сильном деформировании монокристаллические зерна титана распадаются на кластерные структуры размером порядка 100 nm с образованием гидридных частиц на границах этих структур [26]. Водород выступает в этом случае не в виде свободных молекул, а в виде физико-химических комплексных образований, т. е. относительная к общему числу атомов титана концентрация „частиц“ гидридов, обеспечивающих сверхпластическое скольжение, существенно ниже 12%, что хорошо согласуется с нашими результатами для воды.

Время жизни молекулы воды в составе кластера убывает в 24.4 раза при повышении температуры и равно  $3.9 \cdot 10^{-10}$  s в диапазоне температур  $0-36.6^\circ\text{C}$  и  $1.6 \cdot 10^{-11}$  s в диапазоне температур  $36.6-100^\circ\text{C}$ . Эти значения времени жизни существенно превышают величину  $\sim 10^{-12}$  s [15], которая считается характеристикой среднего времени жизни водородных связей. В работе [15] это время считается временем жизни всего кластера воды, при этом не учитывается тот факт, что разрыв одной водородной связи не означает разрушения всего кластера.

Полученное нами превышение времени жизни молекулы в кластере относительно среднего времени разрыва водородной связи [15] зависит от температуры. С одной стороны, наличие такой зависимости очевидно. С другой стороны, в диапазоне температур 0–36.6°C это превышение составляет 390 раз, а в диапазоне 36.6–100°C — 16 раз. Столь существенное расхождение оценок времени жизни кластеров требует дальнейшего исследования.

Число молекул в составе кластеров воды в диапазоне температур 0–100°C убывает от 100 000 до 250, соответственно. Эти результаты во много раз расходятся с результатами экспериментальных и теоретических исследований. Так, в работах [10,14] устойчивыми считаются кластеры с числом молекул от 3 до 18. В работе [7] во всем диапазоне температур (0–100°C) число молекул в кластере монотонно убывает от 30 до 9 штук. В работе [8] стабильными считаются кластерные структуры с числом молекул 20, 57 и 912 во всем диапазоне температур от 0 до 100°C. Обсуждается миграция протона ( $H^+$ ) в пределах кластера по эстафетному механизму. Этот процесс трудно объяснить с точки зрения соотношения энергий: теплового движения при нормальных условиях  $\sim 0.03$  eV, водородной связи в димере  $(H_2O)_2$  — 0.24 eV [15] и диссоциации  $(H^+ + OH^-)$  — 4.8 eV. То есть процесс диссоциации молекулы воды (внутри кластера) маловероятен, что подтверждается известными данными о дистиллированной воде.

Причину расхождения данных, полученных в настоящей работе, с результатами работ, опубликованных в литературе, можно объяснить различиями методов изучения свойств воды. Единственные эмпирические параметры, использованные в настоящей работе — это температурные зависимости плотности и коэффициента вязкости воды. При измерениях коэффициента вязкости скорость направленного движения воды примерно в 1000 раз меньше скорости теплового движения самих молекул воды. Поэтому воздействием измерительной процедуры на кластеры воды можно пренебречь, чего нельзя сказать о других используемых для анализа кластерной структуры воды методах.

Оптические методы измерений — энергия кванта оптического диапазона имеет значение от 1.5 до 3.0 eV. Энергия квантов при рентгеновских способах исследования составляет 10 keV и выше. Таким образом, при таких „энергичных“ способах измерений мы изучаем не сам кластер, а результат его взаимодействия с фотонами, электронами, нейтронами, энергия которых во много раз превышает не только энергию связи молекул воды с кластером (0.22 и 0.135 eV), но и энергию диссоциации молекулы  $H_2O$ . Образование ионов ( $H^+$ ,  $OH^-$ ) приводит к огромным значениям электрических полей ( $E \sim 1.5 \cdot 10^{11}$  V/m), которые способны полностью разрушить исследуемые структуры воды.

Кроме того, пучки лазера, использованные при проведении исследований в работах [10–15], имеют мощность излучения на  $1 \text{ cm}^2$  поверхности, которая соответствует

падению 1000 фотонов в секунду на каждую молекулу воды в ее поверхностном слое, что может приводить к развитию нелинейных многофотонных процессов.

Полученное в работе значение энергии связи молекулы воды с кластером 0.22 eV очень близко к энергии водородной связи в димере  $(H_2O)_2$  — 0.24 eV [15]. Приведем для сравнения значение теплоты плавления льда, приведенной к 1 молекуле:  $E_{\text{melt}}(1) = 0.0624$  eV/mol [25]. Оказывается, что величина энергии связи молекулы воды с кластером в 3.5 раза превосходит значение теплоты плавления льда на одну молекулу. С учетом того что теплота плавления в некоторой степени определяет механическую прочность твердых тел [28], представление о „твердых“ кристаллитах обосновано. Этим фактом можно объяснить и слабую зависимость сжимаемости воды от давления [25].

Полученные результаты важны для некоторых технологических применений воды (электролиз, сверхъемкие аккумуляторы и конденсаторы [29, 30]). Поперечный размер углеродных нанотрубок, используемых для существенного увеличения поверхности пластин электродов, составляет 5–8 nm при длине канала до десятков тысяч нанометров. Средний размер кластерных структур воды в диапазоне „рабочих“ температур от 0 до 40°C изменяется от 9.5 до 3.4 nm. Он соизмерим с поперечным размером нанотрубок. При малой доле свободных молекул соотношение размеров кластера и диаметра нанотрубок не позволяет достаточно эффективно использовать всю их внутреннюю поверхность.

Важную роль полученные результаты о структуре воды играют в механизме обмена веществ в организме человека. Клетка покрыта мембраной. Вода является переносчиком питательных веществ внутрь клетки. Она же участвует в удалении „отработанных“ шлаков из клетки. Долгое время считалось, что обмен происходит за счет диффузии питательных веществ через мембрану внутрь клетки и шлаков — наружу. Порообразующий белок аквапорин [31] входит в состав мембраны. Сопоставим экспериментально измеренные параметры пор аквапорина со свойствами воды. Средний диаметр поры составляет  $\sim 0.6$  nm, длина канала поры  $\sim 8$ –10 nm.

Размер кластера воды при температуре 36.6°C, согласно нашим данным, превышает поперечный размер поры в  $\sim 8$  раз [24,31]. Следовательно, обмен клетки с окружающей средой обусловлен только свободными молекулами воды.

Средняя длина свободного пробега молекулы  $H_2O$  превышает поперечный размер поры клеточной мембраны в 6 раз. Следовательно, в канале поры — физический вакуум. При температуре 36.6°C скорость молекулы воды равна 655 m/s. При такой скорости время пробега молекулы воды вдоль канала поры в мембране составит порядка  $1.5 \cdot 10^{-11}$  s.

При значении потока молекул  $H_2O$  через пору, равном  $3 \cdot 10^9$  1/s [31], средний временной интервал между молекулами составит  $3.3 \cdot 10^{-10}$  s. Следовательно, временной интервал между молекулами воды в 22 раза превышает

время пролета молекулы сквозь канал поры в мембране. Таким образом, 95% времени канал аквапорина пуст и возможен не только процесс поступления питательных веществ внутрь клетки, но и обратный процесс — удаление отработанных шлаков из клетки через один и тот же канал.

Оценим, как механизм клеточного обмена на молекулярном уровне согласуется с макроскопическими параметрами водного обмена организма взрослого человека массой 75 kg.

В состоянии покоя (без физической нагрузки) при значении пульса 60–80 ударов в минуту, сердце многократно перекачивает полный объем крови 5.51 (или 7.92 м<sup>3</sup> в сутки). Секундный расход крови составит 92 см<sup>3</sup>/s, что в пересчете на воду, содержащуюся в крови, составит 48.1 см<sup>3</sup>/s. Число молекул воды, прокачиваемой за 1 s, составит  $1.6 \cdot 10^{24}$ . Из всего количества молекул только малая доля (0.63%) представлена в виде отдельных молекул. Таким образом, поток свободных молекул составит  $1.23 \cdot 10^{22}$  1/s.

Поток молекул воды через пору аквапорина измерен экспериментально [31] и составляет  $3 \cdot 10^9$  1/s. Следовательно, минимальное общее число пор аквапорина в организме человека должно составлять  $4.1 \cdot 10^{12}$ . Полное число клеток эритроцитов является стандартной величиной для здорового человека и составляет в среднем  $4.75 \cdot 10^{12}$  на литр для мужчин и  $4.25 \cdot 10^{12}$  на литр для женщин. Организм мужчины содержит в среднем 5.51 крови, женщины — 3.91 крови. Следовательно, организм мужчины содержит в среднем  $26.1 \cdot 10^{12}$  эритроцитов, а организм женщины —  $16.6 \cdot 10^{12}$  эритроцитов. За счет работы сердца полный объем крови прокачивается в организме за 60 s, откуда получаем, что за одну секунду в процессе переноса питательных веществ участвует  $0.435 \cdot 10^{12}$  эритроцитов в мужском и  $0.28 \cdot 10^{12}$  эритроцитов в женском организме. Таким образом, суммарное число пор аквапорина, обеспечивающих нормальную жизнедеятельность организма, составляет  $4.1 \cdot 10^{12}$  1/s. Следовательно, каждый эритроцит должен содержать 9 пор для мужчин и 11 пор для женщин.

При физических нагрузках секундный расход крови возрастает примерно в 3 раза, во столько же раз возрастает и число клеток эритроцитов, участвующих в процессе обмена веществ за 1 s. Вероятно, основной механизм заключается в увеличении интенсивности обмена через каждую пору за счет роста температуры крови.

Тренированный спортсмен во время соревнований за счет увеличения частоты пульса, объема и мощности сердца способен увеличить циркуляцию крови в 6.4 раза. Причем как минимум половину этого увеличения может обеспечить дополнительный объем крови, поступающий при физических нагрузках в кровеносную систему, а еще три раза набираются за счет интенсификации обмена в каждой поре.

Вероятнее всего, такая интенсификация имеет ограничения, которые могут стать предметом дальнейших исследований.

## Заключение

Во всем диапазоне температур от 0 до 100°C вода имеет кластерную структуру. Оценки показывают, что основная доля молекул воды (до 99%) находится внутри кластеров. Кластеры представляют собой твердые конструкции. Энергия связи молекулы воды с кластером в  $\sim 3.5$  раза превосходит теплоту плавления льда, отнесенную к одной молекуле. Время жизни молекулы в составе кластера существенно больше времени тепловых колебаний молекул в твердом теле. Таким образом, гипотеза Я.И. Френкеля [3] о характере теплового движения атомов (молекул) жидкости получает свое количественное обоснование. Подтверждена также идея Рентгена [4] о двухкомпонентной структуре воды.

Данные о повышенной прочности кластерных структур имеют большое значение для технологических приложений. Этот эффект нуждается в более подробном изучении.

Сопоставление размеров пор в клеточных мембранах с размером кластера воды показывает, что обмен веществ через поры носит молекулярный характер.

Полученные данные об относительно небольшом количестве свободных молекул хорошо согласуются с данными о механизмах сверхпластичности насыщенного водородом титана.

Исследование выполнено при поддержке программ Президиума РАН № 31.

## Список литературы

- [1] Данков П.Д., Кочетков А.А. // ДАН СССР. 1934. Т. 2. № 6. С. 359.
- [2] Stewart G.W., Roger M. // Phys. Rev. 1927. Vol. 30. N 3. P. 232–244. DOI:10.1103/PhysRev.30.232
- [3] Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Изд-во АН СССР, М., Л.: 1945. 357 с.
- [4] Röntgen W.C. // Annalen der Physik. 1892. Vol. 281. N 1. P. 91–97. DOI:10.1002/andp.18922810108
- [5] Маленков Г.Г. // Журнал структурной химии. 2007. Т. 47. С. 5–35.
- [6] Слесарев В.И. Химия. Основы химии живого. СПб.: Химиздат, 2007. 784 с.
- [7] Саргаева Н.П., Саргаев П.М. // Известия РГПУ им. А.И. Герцена, 2007. Т. 7. № 26. С. 112–126.
- [8] Мосин О.В. // Электроника и связь. 2002. № 15. С. 24–29.
- [9] Третьяков М.Ю. и др. // УФН. 2014. Т. 184. № 11. С. 1199–1215. DOI: 10.3367/UFNr.0184.201411c.1199 [Tretyakov M.Yu. et al. // Phys. Usp. 2014. Vol. 57. N 12. P. 1083–1098.]
- [10] Moro R., Rabinovich R., Xia C., Kresin V.V. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. N 12. P. 123401–123404. DOI:10.1103/PhysRevLett.97.123401
- [11] Коваленко В.Ф., Бордюк А.Ю., Шутков С.В. // Оптика атмосферы и океана. 2011. Т. 24. № 7. С. 601–605.
- [12] Черникова Т.М., Иванов В.В., Михайлова Е.А. // Механика. 1997. Т. 38. № 1. С. 136–139.

- [13] Бункин Н.Ф., Сюзов Н.В., Ципенюк Д.Ю. // Квант. электрон. 2005. Т. 35. № 2. С. 180–184.  
DOI: 10.1070/QE2005v035n02ABEH002898 [Bunkin N.F. et al. // Quant. Electron. 2005. Vol. 35. N 2. P. 180–184.]
- [14] Саркисов Г.Н. // УФН. 2006. Т. 176. № 8. С. 833–845.  
DOI: 10.3367/UFNr.0176.200608b.0833 [Sarkisov G.N. // Phys. Usp. 2006. Vol. 49. P. 809–820.]
- [15] Захаров С.Д., Мосягина И.В. Кластерная структура воды (обзор) // Препринт Физический ин-т им. П.Н. Лебедева РАН, 2011. 24 с.
- [16] Barbour L.J., Orr G.W., Atwood J.L. // Nature. 1998. Vol. 393. N 6686. P. 671–673. DOI: 10.1038/31441
- [17] Lang S.M. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2016. Vol. 18. N 23. P. 15727–15737. DOI: 10.1039/c6cp00779a
- [18] Atrazhev V.V. et al. // J. The Electrochem. Society. 2017. Vol. 164. N 12. P. F1265–F1271. DOI: 10.1149/2.0041713jes
- [19] Chaban V.V. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. Vol. 20. N 3. P. 23754–23761. DOI: 10.1039/c8cp04012e
- [20] Verdaguer A. et al. // Chem. Rev. 2006. Vol. 106. N 4. P. 1478–1510. DOI: 10.1021/cr040376l
- [21] Liu J. et al. // Chem. Sci. 2018. Vol. 9. P. 2065–2073.  
DOI:10.1039/C7SC04205A
- [22] Хвольсон О.Д. Курс физики. Л.М.: Государственное технико-теоретическое издательство, 1933. 657 с.
- [23] Хастед Дж. Физика атомных столкновений. М.: Мир, 1965. 465 с.
- [24] Полянская А.В., Полянский А.М. // Тезисы докладов I Российской конф. „Физика — наукам о жизни“. СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2016. С. 91.
- [25] Григорьев И.С., Мейлехов Е.З. Физические величины. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- [26] Мурзинова А., Салищев Г.А., Афоничев Д.Д. // Физика металлов и металловедение. 2007. Т. 104. № 2. С. 204–211.
- [27] Колачев Б.А. и др. // Технология легких сплавов. 2007. № 3. С. 10–26.
- [28] Polyanskiy A.M. et al. // Acta Mechanica. 2018. Vol. 229. N 12. P. 4863–4873. DOI:10.1007/s00707-018-2262-8
- [29] Богданов А.А., Полянский А.М., Фих А.Я. // Сборник трудов IX Междунар. конф. „Современный физический практикум“. Волгоград. 2006. С. 134.
- [30] Елецкий А.В., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А. // Технические науки — от теории к практике Россия, Новосибирск, 2013. С. 105–112.
- [31] Murata K. et al. // Nature. 2000. Vol. 407. N 6804. P. 599–605. DOI:10.1038/35036519