

ТОЛЩИНА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ВОДЫ И ЭТАНОЛА

В.М. Юров¹, К.Н. Жангозин²

¹НАО «Карагандинский технический университет им. А. Сагинова»
100056, Республика Казахстан, Караганда, ул. Назарбаева, 56

²ТОО «ТСК-Восток»
010000, Республика Казахстан, Астана, проспект Сарыарка, 3/2, 40
exciton@list.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.338

Аннотация: Предложена теоретическая модель, позволяющая определять толщину поверхностного слоя жидкости $R(I)$. Для воды и этанола она оказалась равной 1,1 нм. Как следствие, этанол неограниченно растворяется в воде. Метилацетат, бензол и толуол ($R(I)$ выше 1,4 нм), образует с водой азеотропные смеси. Глицерин, нитробензол и ртуть ($R(I)$ больше 3 нм) практически нерастворимы в воде. Из предложенной модели можно сделать вывод, что поверхностный слой жидкости представляет собой наноструктуру с размерными эффектами. При этом толщина поверхностного слоя воды совпадает с толщиной поверхностного слоя у железа, кобальта и никеля. Найдены также работа адгезии и упругие постоянные для воды и этанола, включая модуль Юнга. Установлено, что упругость воды лишь в 100 раз меньше упругости стали, т.е. воду можно рассматривать как несжимаемое вещество, а внутреннее трение в воде в три раза больше, чем в этаноле. Показано также, что универсальным элементом геометрии пространств жидких систем является тетраэдр, отвечающий sp^3 -гибридизации межатомных или межмолекулярных связей.

Ключевые слова: поверхностный слой, вода, этанол, жидкость, толщина слоя, кластер.

1. Введение

Прав был А. Эддингтон, который писал (цитируется по работе [1]), что «идеал, к которому мы стремимся, заключается в объединении всех наших знаний о физическом мире в единую науку, положения которой могут быть выражены в терминах геометрических или квазигеометрических концепций». «Правильность этого взгляда подтверждает все нарастающая геометризация наук о материи» (цитируется по работе [2]).

В работах [3-6] мы выдвинули концепцию о геометрической модели толщины поверхностного слоя твердого тела. Она оказалась равной от 1 до 6 нм для металлов, от 10 до 20 нм для сложных минералов, от 30 до 130 нм для фуллеренов, полимеров и т.д. В большинстве случаев она представляет собой наноструктуру, где проявляются размерные эффекты.

В настоящей работе мы определим толщину поверхностного слоя некоторых жидкостей и отдельно рассмотрим воду и этанол.

2. Описание модели

Согласно [3] для толщины поверхностного слоя твердого тела имеем:

$$R(I) = \frac{2\gamma \cdot \nu}{R_0 \cdot T}, \quad (1)$$

где γ – поверхностное натяжение, $\nu = M/\rho$ – молярный объем (M – молярная масса, ρ – плотность), R_0 – универсальная газовая постоянная, T – температура. Тогда размерность $R(I) = 0,24 \cdot 10^{-6} \gamma M/\rho T$ [м]. Вычислим по формуле (1) величину $R(I)$ для некоторых жидкостей и представим их в Таблице 1.

Таблица 1. Параметры некоторых жидкостей при $T = 25^\circ\text{C}$.

Жидкость	M , г/моль	ρ , г/см ³	$R(I)$, нм	γ , мН/м	V_C , м/с
вода H_2O	18,015	0,9984	1,1	72,8	1490
этанол C_2H_6O	46,069	0,7895	1,1	22,4	1180
ацетон C_3H_6O	58,030	0,7899	1,2	21,2	1190
метилацетат $C_3H_6O_2$	74,08	0,9330	1,4	22,4	–
пентан C_5H_{12}	72,15	0,6262	1,5	15,5	–
бензол C_6H_6	78,110	0,8786	2,0	28,2	1324
толуол C_7H_8	92,140	0,8669	2,4	27,9	1324
глицерин $C_3H_8O_3$	92,090	1,261	3,5	59,4	1923
нитробензол $C_6H_5O_2$	123,06	1,199	3,5	42,7	–
ртуть Hg	200,592	13,546	5,8	486,2	1453

здесь V_C – скорость звука.

Из Таблицы 1 сразу следует зависимость растворимости жидкости в воде от толщины поверхностного слоя (от его геометрии). Этанол и ацетон, имея $R(I)$ близкое к воде, растворяется в ней неограниченно. Метилацетат, бензол, толуол с водой ($R(I)$ выше 1,4 нм), образует азеотропные смеси. Глицерин, нитробензол и ртуть ($R(I)$ больше 3 нм) практически нерастворимы в воде. В слое толщиной $R(I)$ наблюдаются размерные эффекты и из нашей модели [9] следуют соотношения:

$$A(h) = A_0 \left(1 - \frac{R(I)}{h} \right), \quad h \gg R(I), \quad (2)$$

$$A(h) = A_0 \left(1 - \frac{R(I)}{R(I) + h} \right), \quad 0 < h < R(I),$$

где h – ось, перпендикулярная плоскости образца ($h = z$), $A(h)$ – физическое свойство слоя толщиной $R(I)$. Первое равенство в формуле (2) представляет собой формулу Толмена [7], в которой значение $R(I)$ равно постоянной Толмена δ .

3. Структура воды

Вопрос о толщине поверхностного слоя воды, как и всех жидкостей, где происходит отличие их физических свойств от объема, остается пока открытым. П. Лаплас рассматривал поверхностный слой жидкости как тонкую сплошную пленку, обладающую упругими свойствами твердого тела [8]. Согласно Русанову А.И. под толщиной поверхностного слоя нужно понимать слой воды, который электрически нейтрален и составляет размер 1-2 нм [9]. В 1993 году Кен Джордан предложил свои варианты устойчивых «квантов воды», которые состоят из 6 ее молекул (размер порядка 1,15 нм) [10]. Интересной особенностью этой модели является то, что из нее автоматически следует, что свободно растущие кристаллы воды, хорошо известные нам снежинки, должны обладать 6-лучевой симметрией. Кластерная структура воды была далее развита Смирновым А.Н. [11], который определил поверхностный слой в пределах 100-250 нм. Последующие эксперименты и расчеты *ab initio* позволили выяснить подробнее о кластерной структуре воды [12-16]. По их мнению, количественно кластеры воды содержат от 3-х (0,579 нм) до 50-ти (9,65 нм) молекул воды в каждый. Таким образом, понятие поверхности воды и ее толщины до сих пор не определено и колеблется от 1-2 до 100-250 нм. Нами определена толщина поверхностного слоя воды равная 1,1 нм (см. Таблицу 1). Можно сделать вывод, что толщина поверхностного слоя воды отвечает условиям П. Лапласа [8] и А.И. Русанова [9], а также кластерам Кен Джордана [10] и представляет собой наноструктуру с размерными эффектами.

Если принять в последнем соотношении формул (2) $A(h) = \rho$ – плотность воды при $T=25^\circ\text{C}$, то среднее значение (с учетом того, что $h = 0 + R(I)/2 = 0,5R(I)$) будет равно $\rho[R(I)] \approx 0,3\rho_0$. Это означает, что в слое $R(I)$ плотность воды в три раза меньше плотности воды в объеме. Это отвечает модели Робинсона и др. [17], где вода описывалась как смесь взаимно конвертирующихся кластеров малой плотности и высокоплотных кластеров. Эта модель подробно обсуждалась в работе [12]. Слой воды размером $R(I)$ назовем фазой I, а весь остальной объем – фазой II. Между этими фазами при $h = R(I)$ происходит фазовый переход «жидкость-жидкость» [3], подробно исследованный в работе [18]. Сравнение толщины поверхностного слоя воды $R(I) = 1,1$ нм с данными из работы [3] показывает, что она примерно равна $R(I)$ для железа, кобальта и никеля, которые называют триадой железа. У воды (аналогично «стенкам Блоха» у железа) существуют разделяющие «перегородки» между электрическими диполями. У железа стенки Блоха образуют домены, а у воды образуются дипольные кластеры, которые позволяют проявлять магнитные и

электрические свойства, а также иметь (как и у железа) непосредственно свою «память» [19-21]. Молекула воды показана на рис. 1 а.

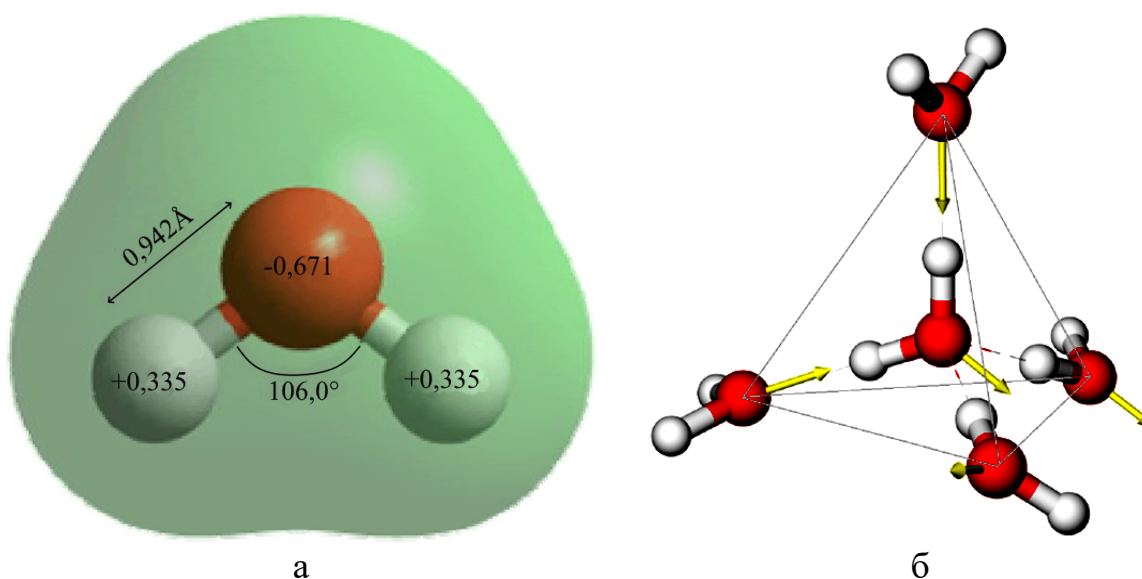


Рис. 1. Молекула воды (а); тетраэдрическая координация молекул воды (б) [15, 22].

Атомы водорода не только ковалентно связаны со своими атомами кислорода, но и притягиваются к другим соседним атомам кислорода в другой молекуле воды, образуя водородные связи. Водородные связи и высокая плотность молекул, связанная с их малым размером, создают сильное сцепление в жидкой воде. Водородные связи прочны, когда три атома $O-H-O$ находятся близко к прямой линии (см. рис. 1 б) [15]. Квантовые расчеты кластеров $(H_2O)_n$, где $n = 6-20$, показали, что самые устойчивые структуры образуются при взаимодействии тетрамерных и пентамерных структур (см. рис. 2) [22]. При этом структуры $(H_2O)_n$, где $n = 8, 12, 16$, и 20 являются кубическими, а структуры $(H_2O)_{10}$ и $(H_2O)_{15}$ – пентамерными. Кластеры с $n = 9, 11, 13, 14, 17, 18$ и 19 имеют смешанное строение.

4. Кластерная структура этанола

Молекула этанола обусловлена связями $O-H$ и $C-O$, которым присуща sp^3 -гибридизация и валентный угол связи $C-O-H$ близок к тетраэдрическому (около 105°). Каждая из двух других $2sp^3$ -атомных орбиталей кислорода занята неподеленной парой электронов. Кластеры этанола привлекли значительное экспериментальное и теоретическое внимание [23-25]. По сравнению с молекулами воды, которые могут образовывать до четырех H -связей, алкильная группа в молекуле этанола ограничивает количество межмолекулярных H -связей (см. рис. 3).

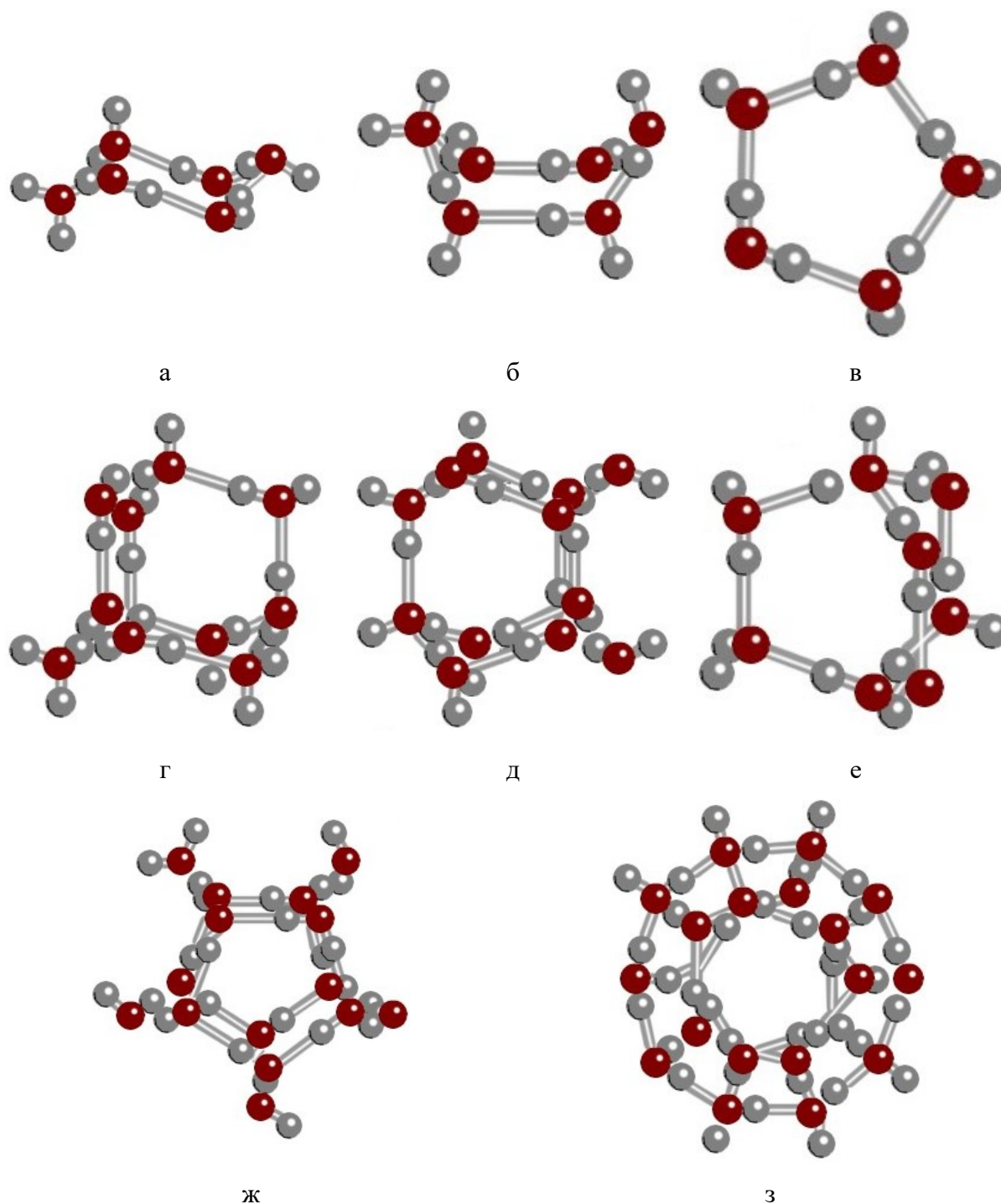


Рис. 2. Возможные кластеры воды $(H_2O)_n$, где $n = 6-20$ [22].

Взаимодействие между образованием H -связки и отталкиванием между алкильными группами определяет структуру и стабильность кластеров этанола. Для небольших кластеров спирта, таких как метанол или этанол H -связи играют ключевую роль в определении наиболее стабильных структур [26], тогда как алкильные цепи оказывают более

выраженный эффект в более крупных кластерах, как показано при исследовании бутанолов [27].

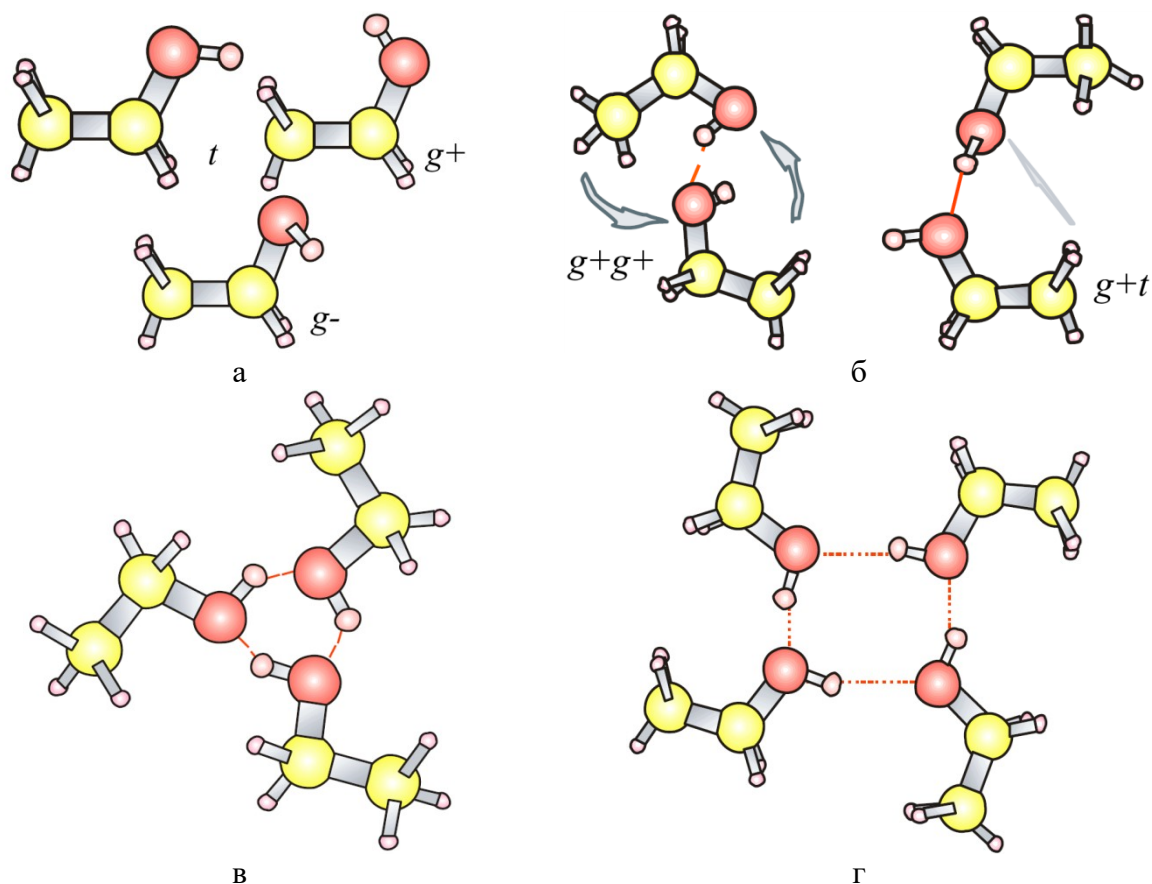


Рис. 3. Основные типы кластеров этанола: а – мономер; б – димер; в – тример; г – тетрамер. Принятые обозначения: *t* – trans, *g* – gauche конформации в обозначениях [23].

5. Упругие свойства воды и этанола

По Лапласу поверхностный слой жидкости представляет собой сплошную пленку, обладающую упругими свойствами твердого тела [8]. Внутренние напряжения ε_{is} между фазами I и объемом воды и этанола можно просчитать по формуле [28]:

$$\varepsilon_{is} = \sqrt{[W_a / R(I)] \cdot E} \quad (3)$$

Сила адгезии для жидкостей равна:

$$F(I) = \gamma_1 \cdot R(I). \quad (4)$$

Работа адгезии W_a определяется по формуле Дюпре [28]:

$$W_a = \gamma_1 + \gamma - \gamma_{12}, \quad (5)$$

где γ_1 , γ и γ_{12} – поверхностное натяжение слоя $R(I)$ и объема и межповерхностного слоя.

Поверхностное натяжение слоя толщиной $R(I)$ по формуле (2) равно:

$\gamma_1 \approx 0,3\gamma$, $a \cdot \gamma_{12} = 0,2\gamma$, $W_a = 1,1\gamma$. Мерой внутреннего трения является обратная добротность Q^{-1} , которая по Дебаю равна [29]:

$$Q^{-1} = 2Q_{\max}^{-1} \frac{2\pi f\tau}{1 + (2\pi f\tau)^2}, \quad (6)$$

где f – частота колебаний образца, τ – время релаксации.

Максимальное значение внутреннего трения достигается при $2\pi f\tau = 1$. Время релаксации τ можно определить для слоя $R(I)$, зная скорость звука в жидкости – $\tau = R(I)/V_c$. Рассчитанные упругие параметры воды и этанола показаны в Таблице 2, где обозначение E отвечает модулю Юнга.

Таблица 2. Упругие параметры воды и этанола.

Жидкость	$F(I)$, нН	ϵ_{is} , МПа	W_a , Дж/м ²	E , ГПа
вода H_2O	0,0267	393,7	0,081	2,1
этанол C_2H_6O	0,0082	140,0	0,024	0,9

Сила адгезии $F(I)$ (сила межмолекулярного взаимодействия) у воды и этанола составляет порядка $(0,03-0,01) \cdot 10^{-9}$ Н. Для сравнения: сила притяжения между электроном и протоном в атоме водорода – $F = 0,2 \cdot 10^{-9}$ Н; сила звукового давления в ухе человека у порога слышимости – $F = 2 \cdot 10^{-9}$ Н.

В качестве примера, приведем значения модуля Юнга стали и воды: E (стали) = $2 \cdot 10^{11}$ Па и E (воды) = $2 \cdot 10^9$ Па. Таким образом, мы видим, что упругость воды всего только в 100 раз меньше упругости стали, значит, воду можно рассматривать как несжимаемое вещество [30]. Этанол также можно рассматривать как несжимаемое вещество. Однако, упругие параметры этанола в 2 раза меньше упругих параметров воды, из-за различия взаимодействия посредством H -связей.

Время релаксации τ для воды и этанола: $\tau(H_2O) = R(I)/v_c = 2,2 \cdot 10^{-12}$ с и $f(H_2O) = 2,8 \cdot 10^{12}$ Гц; $\tau(C_2H_6O) = 2,7 \cdot 10^{-12}$ с и $f(C_2H_6O) = 2,3 \cdot 10^{12}$ Гц. Здесь мы учли, что в слое толщиной $R(I)$ скорость звука по формуле (2) равна $v_c \approx 0,3V_c$. Это значит, что для слоя толщиной $R(I)$ наблюдается терагерцевое (10^{12} Гц) излучение. До недавнего времени большая часть терагерцевого спектра не использовалась (а значит, не исследован спектр в $R(I)$ -слое) в связи с тем, что отсутствовали как источники, так и приемники когерентного излучения этого диапазона. Поэтому терагерцовый участок электромагнитного спектра называли «терагерцовым провалом». Лишь с появлением первого терагерцевого квантового каскадного лазера (ККЛ) и последовавшего значительного прогресса в

разработке терагерцового ККЛ «терагерцовый провал» в электромагнитном спектре постепенно начал закрываться [31].

Поскольку между слоем $R(I)$ и объемной фазой возникают внутренние напряжения ε_{is} , то они приводят к внутренним затухающим волнам. Эти волны мы сопоставляем к внутреннему трению $\mu \sim W_a$. По современным представлениям внутреннее трение – это способность материалов рассеивать энергию механических колебаний, переводя ее в тепло [29]. Внутреннее трение в воде в 3 раза больше, чем в этаноле (см. Таблицу 2).

6. Тетраэдрическая метрика воды и этанола

«Универсальным элементом геометрии пространств литосферы, гидросферы Земли и водной среды жидких систем является тетраэдр, отвечающий sp^3 -гибридизации межатомных или межмолекулярных связей» [32]. В наших системах также присутствует sp^3 -гибридизация и наблюдается тетраэдрическая метрика воды и этанола.

В работе [33], используя понятие «модуль» построена двумерная структура поверхностного слоя воды в виде сетки молекул, отвечающей стереохимическим параметрам со свободными Н-связями. Толщина этого слоя оказалась равной $\sim 1,02$ нм (при длине водородной связи, принятой равной $2,75 \text{ \AA}$), т.е. примерно равного нашему $R(I) = 1,1$ нм. Последующие работы [34-36] этих авторов подтвердили предложенную модель структуры поверхностного слоя воды. Были построены кластерно-стержневые структуры из тетраэдрических атомов, которые соответствуют по метрике и топологии мышечной ткани и клатриновой сетке и могут образовываться водой в этих системах. Наша модель поверхностного слоя воды дополняет отмеченные выше модели.

7. Заключение

Предложенная нами модель поверхностного слоя жидкостей, описывает его свойства, включая упругие характеристики, и может помочь в дальнейшем технологическом освоении как воды, так и этилового спирта, а также их смесей. Например, вода Мертвого моря отличается рядом особенностей и, прежде всего, высокой соленостью. Сравнение данных солености разных водоемов показывает, что соленость Мертвого моря в 8 раз превышает соленость Атлантического океана, в 7 раз Средиземного и Красного морей, в 14,5 раз – Черного и в 40 раз – Балтийского. Насыщенная солями вода Мертвого моря очень плотная и содержит 31% растворенных в ней солей. Молекулярная масса и плотность Мертвого моря равны, соответственно: $M = 46,4$ г/моль и $\rho = 1,234$ г/см³ и

по формуле (1) – $R(I) = 2,3$ нм, т.е. в два раза больше, чем у обычной пресной воды. Отметим, также, sp^3 -гибридизацию межатомных или межмолекулярных связей в воде и этаноле.

Библиографический список:

1. **Thompson, M.** Philosophy for Life (Teach Yourself) / M. Thompson. – John Murray Press, 2018. – 320 p.
2. **Бульенков, Н.А.** Системно-структурное модульное обобщение кристаллографии связанной воды для изучения механизмов процессов в биосистемах на атомно-молекулярном уровне / Н.А. Бульенков // Кристаллография. – 2011. – Т 56. – № 4. – С. 729-746.
3. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя, поверхностная энергия и атомный объем элемента / В.М. Юров, С.А. Гученко, В.Ч. Лауринас // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 691-699. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.691.
4. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя атомарно-гладких кристаллов / В.М. Юров // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 389-397. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.389.
5. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя и анизотропия поверхностной энергии кубических кристаллов рутения / В.М. Юров, В.И. Гончаренко, В.С. Олешко, С.А. Гученко // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 522-533. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.522.
6. **Юров, В.М.** Толщина поверхностного слоя каркасных углеводов / В.М. Юров, В.С. Портнов, А.Д. Маусымбаева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 331-341. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.331.
7. **Tolman, R.C.** The effect of droplet size on surface tension / R.C Tolman // Journal of Chemical Physics. – 1949. – V. 17. – I. 2. – P. 333-337. DOI: 10.1063/1.1747247.
8. **Лаплас, П.С.** Изложение системы мира / П.С. Лаплас. – Л.: Наука, – 1982. – 376 с.
9. **Русанов, А.И.** Метод двух разделяющих поверхностей в термодинамике тонких пленок / А.И. Русанов // В книге: Поверхностные силы и граничные слои жидкостей; под ред. Б.В. Дерягина. – М.: Наука, 1983. – С. 152-159.
10. **Tsai, C.J.** Theoretical study of the $(H_2O)_6$ cluster / C.J. Tsai, K.D. Jordan // Chemical Physics Letters. – 1993. – V. 213. – I. 1-2. – P. 181-188. DOI: 10.1016/0009-2614(93)85438-T.
11. **Смирнов, А.Н.** Новые структуры воды-эмулоны / А.Н. Смирнов // Химия и жизнь. – 2012. – № 12. – С. 36-39.
12. **Nilsson, A.** Perspective on the structure of liquid water / A. Nilsson, L.G.M. Pettersson // Chemical Physics. – 2011. – V. 389. – I. 1-3. – P. 1-34. DOI: 10.1016/j.chemphys.2011.07.021
13. **Игнатов, И.** Математические модели, описывающие структуру воды / И. Игнатов, О.В. Мосин, Б. Великов // Интернет-журнал «НАУКОВЕДЕНИЕ». – 2013. – № 3 (16). – 25 с.
14. **Chen, M.** Ab initio theory and modeling of water / M. Chen, H.-Yu. Ko, R.C. Remsing et al. // PNAS. – 2017. – V. 114. – № 41. – P. 10846-10851. DOI: 10.1073/pnas.1712499114.
15. **Chaplin, M.F.** Structure and properties of water in its various states / M.F. Chaplin. // In: Encyclopedia of Water: Science, Technology, and Society; ed. by P.A. Maurice. – John Wiley & Sons, 2019. – P. 1-19. DOI: 10.1002/9781119300762.wsts0002.
16. **Полянская, А.В.** Связь явлений переноса с характеристиками кластерной структуры воды / А.В. Полянская, А.М. Полянский, В.А. Полянский // Журнал технической физики. – 2019. – Т. 89. – Вып. 6. – С. 958-964. DOI: 10.21883/JTF.2019.06.47647.367-18.
17. **Urquidi, J.** Origin of temperature and pressure effects on the radial distribution function of water / J. Urquidi, S. Singh, C.H. Cho, G.W. Robinson // Physical Review Letters. – 1999. – V. 83. – I. 12. – P. 2348-2350. DOI: 10.1103/PhysRevLett.83.2348.
18. **Poole, P.H.** Phase-behavior of metastable water / P.H. Poole, F. Sciortino, U. Essmann, H.E. Stanley // Nature. – 1992. – V. 360. – P. 324-328. DOI: 10.1038/360324a0.
19. **Артемьев, В.Г.** Электрические свойства воды. Новый взгляд / В.Г. Артемьев, А.А. Волков // Биофизика. – 2014. – Т. 59. – № 4. – С. 636-640.
20. **Wanga, Y.** Effect of magnetic field on the physical properties of water / Y. Wanga, H. Weia, Zh. Lia // Results in Physics. – 2018. – V. 8. – P. 262-267. DOI: 10.1016/j.rinp.2017.12.022.
21. **Beauvais, F.** Memory of water and blinding / F. Beauvais // Homeopathy. – 2008. – V. 97. – I. 1. – P. 41-42. DOI: 10.1016/j.homp.2007.10.001.

22. **Maheshwary, S.** Structure and stability of water clusters (H₂O)_n, n=8-20: an ab initio investigation / S. Maheshwary, N. Patel, N. Sathyamurthy et al. // *The Journal of Physical Chemistry A*. – 2001. – V. 105. – I. 46. – P. 10525-10537. DOI: 10.1021/jp013141b.
23. **Liu, Y.** Geometries and energetics of methanol–ethanol clusters: a VUV laser/time-of-flight mass spectrometry and density functional theory study / Y. Liu, S. Consta, F. Ogeer et al. // *Canadian Journal of Chemistry*. – 2007. – V. 85. – № 10. – P. 843-852. DOI: 10.1139/V07-104.
24. **Buck, U.** Structure and vibrational spectra of methanol clusters from a new potential model / U. Buck, J.-G. Siebers, R.J. Wheatley // *The Journal of Chemical Physics*. – 1998. – V. 108. – I. 1. – P. 20-32. DOI: 10.1063/1.475361.
25. **Jorgensen, W.L.** Optimized intermolecular potential functions for liquid alcohols / W.L. Jorgensen // *The Journal of Physical Chemistry*. – 1986. – V. 90. – I. 7. – P. 1276-1284. DOI: 10.1021/j100398a015.
26. **Shi, Y.J.** A 118 nm vacuum ultraviolet laser/time-of-flight mass spectroscopic study of methanol and ethanol clusters in the vapor phase / Y.J. Shi, S. Consta, A.K. Das et al. // *The Journal of Chemical Physics*. – 2002. – V. 116. – I. 16. – P. 6990-6999. DOI: 10.1063/1.1466467.
27. **Fanourgakis, G.S.** A spectroscopic and computer simulation study of butanol vapors / G.S. Fanourgakis, Y.J. Shi, S. Consta, and R.H. Lipson // *The Journal of Chemical Physics*. – 2003. – V. 119. – I 13. – P. 6597-6608. DOI: 10.1063/1.1605384.
28. **Зимон, А.Д.** Адгезия пленок и покрытий / А.Д. Зимон. – М.: Химия, 1977. – 352 с.
29. **Головин, И.С.** Внутреннее трение и механическая спектроскопия металлических материалов / И.С. Головин. – М.: Изд. дом МИСиС, 2012. – 247 с.
30. **Андрижиевский, А.А.** Механика жидкости и газа / А.А. Андрижиевский. – Минск: БГТУ, 2014. – 203 с.
31. **Царев, М.В.** Генерация и регистрация терагерцового излучения ультракороткими лазерными импульсами / М.В Царев. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, – 2011. – 75 с.
32. **Холманский, А.С.** Дихотомия правого и левого / А.С. Холманский // *Квантовая Магия*. – 2007. – Т. 4. – Вып. 3. – С. 3125-3131.
33. **Бульенков, Н.А.** Функциональная модульная динамическая модель поверхностного слоя воды / Н.А. Бульенков, Е.А. Желиговская // *Журнал физической химии*. – 2006. – Т. 80. – № 10. – С. 1784-1805.
34. **Бульенков, Н.А.** Роль поверхностного слоя водной субфазы в механизме самоорганизации текстур сульфидов металлов под ленгмюровским монослоем / Н.А. Бульенков, Е.А. Желиговская, В.В. Клечковская, Г.И. Ивакин // *Кристаллография*. – 2011. – Т. 56. – № 3. – С. 555-564.
35. **Желиговская, Е.А.** Стержневые структуры связанной воды: их возможная роль в самоорганизации биологических систем и недиссипативной передаче энергии / Е.А. Желиговская, Н.А. Бульенков // *Биофизика*. – 2017. – Т. 62. – № 5. – С. 837-845.
36. **Желиговская, Е.А.** Структурные механизмы фазовых переходов водных льдов II, IV и V в метастабильный лед Ic при атмосферном давлении / Е.А. Желиговская // *Журнал физической химии*. – 2023. – Т. 97. – № 1. – С. 13-20. DOI: DOI: 10.31857/S0044453723010399.

References:

1. Thompson M. *Philosophy for Life (Teach Yourself)*, John Murray Press, 2018, 320 p.
2. Bulienkov N.A. Systemic structural modular generalization of the crystallography of bound water applied to study the mechanisms of processes in biosystems at the atomic and molecular level, *Crystallography Reports*, 2011, vol. 56, no. 4, pp. 680-697. DOI: 10.1134/S1063774511040043.
3. Yurov V.M., Guchenko S.A., Laurinas V.Ch. Tolshchina poverkhnostnogo sloya, poverkhnostnaya energiya i atomnyj ob'em elementa [Thickness of the surface layer, surface energy and atomic volume of the element], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2018, issue 10, pp. 691-699. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.691. (In Russian).
4. Yurov V.M. Tolshchina poverkhnostnogo sloya atomarno-gladkikh kristallov [Thickness of the surface layer of atomic-smooth crystals], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2019, issue 11, pp. 389-397. (In Russian). DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.389.
5. Yurov V.M., Goncharenko V.I., Oleshko V.S., Guchenko S.A. Tolshchina poverkhnostnogo sloya i anizotropiya poverkhnostnoj energii kubicheskikh kristallov ruteniya [Surface layer thickness and anisotropy of the surface energy of cubic ruthenium crystal], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 522-533. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.522. (In Russian).

6. Yurov V.M., Portnov V.S., Mausimbaeva A.D., Tolschina poverhnostnogo sloya karkasnykh uglevodorodov [The thickness of the surface layer of frame hydrocarbons], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2022, issue 14, pp. 331-341. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.331. (In Russian).
7. Tolman R.C. The effect of droplet size on surface tension, *Journal of Chemical Physics*, 1949, vol. 17, issue 2, pp. 333-337. DOI: 10.1063/1.1747247.
8. Laplace P. S. Exposition du système du monde, 2nd ed., Cambridge University Press, 1795. viii+351 p. DOI: 10.1017/CBO9780511693335. (In French).
9. Rusanov, A.I. Metod dvukh razdelyayushchikh poverhnostey v termodinamike tonkikh plenok [Method of two separating surfaces in the thermodynamics of thin films], *Poverkhnostnye sily i granichnye sloi zhidkostey* [Surface forces and boundary layers of liquids], ed. B.V. Deryagina, Moscow, Nauka Publ., 1983, pp. 152-159. (In Russian).
10. Tsai C.J., Jordan K.D. Theoretical study of the (H₂O)₆ cluster, *Chemical Physics Letters*, 1993, vol. 213, issue 1-2, pp. 181-188. DOI: 10.1016/0009-2614(93)85438-T.
11. Smirnov A.N. Novye struktury vody-emulony [New structures of water-emulons], *Khimiya i zhizn'* [Chemistry and Life], 2012, no. 12, pp. 36-39. (In Russian).
12. Nilsson A., Pettersson L.G.M. Perspective on the structure of liquid water, *Chemical Physics*, 2011, V. 389, issue 1-3, pp. 1-34. DOI: 10.1016/j.chemphys.2011.07.021.
13. Ignatov I., Mosin O.V., Velikov B. Matematicheskie modeli, opisyyvayushchie strukturu vody [Mathematical models describing the structure of water], *Internet-zhurnal «NAUKOVEDENIE»*, 2013, no. 3 (16), 25 p. (In Russian).
14. Chen M., Ko H.-Yu., Remsing R.C. et al. Ab initio theory and modeling of water, *PNAS*, 2017, vol. 114, no. 41, pp. 10846-10851. DOI: 10.1073/pnas.1712499114
15. Chaplin M.F. Structure and Properties of Water in its Various States, *Encyclopedia of Water: Science, Technology, and Society*, ed. by P.A. Maurice, John Wiley & Sons, 2019, pp. 1-19. DOI: 10.1002/9781119300762.wsts0002.
16. Polyanskaya A.V., Polyanskii A.M., Polyanskii V.A. Relationship between transport phenomena and characteristics of the cluster structure, *Technical Physics*, 2019, vol. 64, issue 6, pp. 902-908. DOI: 10.1134/S106378421906015X.
17. Urquidi J., Singh S., Cho C.H., Robinson G.W. Origin of temperature and pressure effects on the radial distribution function of water, *Physical Review Letters*, 1999, vol. 83, issue 12, pp. 2348-2350. DOI: 10.1103/PhysRevLett.83.2348.
18. Poole P.H., Sciortino F., Essmann U., Stanley H.E. Phase-behavior of metastable water, *Nature*, 1992, vol. 360, pp. 324-328. DOI: 10.1038/360324a0.
19. Artemov V.G., Pronin A.V., Volkov A.A. Electrical properties of water: a new insight, *Biophysics*, 2014, vol. 59, issue 4, pp. 520-523. DOI: 10.1134/S0006350914040022.
20. Wanga Y., Weia H., Lia Zh. Effect of magnetic field on the physical properties of water, *Results in Physics*, 2018, vol. 8, pp. 262-267. DOI: 10.1016/j.rinp.2017.12.022.
21. Beauvais F. Memory of water and blinding, *Homeopathy*, 2008, vol. 97, issue 1, pp. 41-42. DOI: 10.1016/j.homp.2007.10.001.
22. Maheshwary S., Patel N., Sathyamurthy N. et al. Structure and stability of water clusters (H₂O)_n, n=8-20: an ab initio investigation, *The Journal of Physical Chemistry A*, 2001, vol. 105, issue 46, pp. 10525-10537. DOI: 10.1021/jp013141b
23. Liu Y., Consta S., Ogeer F. et al. Geometries and energetics of methanol-ethanol clusters: a VUV laser/time-of-flight mass spectrometry and density functional theory study, *Canadian Journal of Chemistry*, 2007, vol. 85, no. 10, pp. 843-852. doi:10.1139/V07-104.
24. Buck U., Siebers J.-G., Wheatley R.J. Structure and vibrational spectra of methanol clusters from a new potential model, *The Journal of Chemical Physics*, 1998, vol. 108, issue 1, pp. 20-32. DOI: DOI: 10.1063/1.475361.
25. Jorgensen W.L. Optimized intermolecular potential functions for liquid alcohols, *The Journal of Physical Chemistry*, 1986, vol. 90, issue 7, pp. 1276-1284. DOI: 10.1021/j100398a015.
26. Shi Y.J., Consta S., Das A.K. et al. A 118 nm vacuum ultraviolet laser/time-of-flight mass spectroscopic study of methanol and ethanol clusters in the vapor phase, *The Journal of Chemical Physics*, 2002, vol. 116, issue 16, pp. 6990-6999. DOI: DOI: 10.1063/1.1466467.
27. Fanourgakis G.S., Shi Y.J., Consta S., Lipson R.H. A spectroscopic and computer simulation study of butanol vapors, *The Journal of Chemical Physics*, 2003, vol. 119, issue 13, pp. 6597-6608. DOI: 10.1063/1.1605384.
28. Zimon A.D. *Adgeziya plenok i pokritii* [Adhesion of films and coatings], Moscow, Khimiya Publ., 1977,

352 p. (In Russian).

29. Golovin I.S. *Vnutrennee trenie i mekhanicheskaya spektroskopiya metallicheskih materialov* [Internal friction and mechanical spectroscopy of metallic materials], Moscow, MISiS Publ., 2012, 247 p. (In Russian).

30. Andriyevskii A.A. *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid and gas mechanics]. – Minsk, BGTU, 2014, 203 p. (in Russian).

31. Tsarev M.V. *Generatsiya i registratsiya teragertsovogo izlucheniya ul'trakorotkimi lazernymi impul'sami* [Generation and detection of terahertz radiation by ultrashort laser pulses], Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod State University Publ., 2011, 75 p. (In Russian).

32. Kholmanskij, A.S. Dikhotomiya pravogo i levogo [Dichotomy of right and left], *Kvantovaya Magiya [Quantum Magic]*, 2007, vol. 4, issue 3, pp. 3125-3131. (In Russian).

33. Bulienkov N.A., Zheligovskaya E.A. Functional modular dynamic model of the surface layer of water, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2006, vol. 80, issue 10, pp. 1584-1604. DOI: 10.1134/S0036024406100086.

34. Bulienkov N.A., Zheligovskaya E.A., Klechkovskaya V.V., Ivakin G.I. Role of the surface layer of aqueous subphase in the self-organization mechanism of metal sulfide textures under a Langmuir monolayer, *Crystallography Reports*, 2011. vol. 56, issue 3, pp. 517-525. DOI: 10.1134/S1063774511020040.

35. Zheligovskaya E.A., Bulienkov N.A. Rod structures of bound water: a possible role in self-organization of biological systems and nondissipative energy transmission, *Biophysics*, 2017, vol. 62, issue 5, pp. 683-690. DOI: 10.1134/S0006350917050256.

36. Zheligovskaya E.A. Structural mechanisms of phase transitions of water ices II, IV, and V to metastable ice Ic at atmospheric pressure, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2023, vol. 97, issue 1, pp. 11-18. DOI: 10.1134/S0036024423010387.

Original paper

SURFACE THICKNESS WATER AND ETHANOL

V.M. Yurov¹, K.N. Zhangozin²

¹*Karaganda Technical University named after A. Saginova, Karaganda, Republic of Kazakhstan*

²*LP «TSK-Vostok», Astana, Republic of Kazakhstan*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.338

Abstract: A theoretical model is proposed that allows one to determine the thickness of the surface layer of liquid $R(I)$. For water and ethanol it turned out to be 1,1 nm. As a result, ethanol is unlimitedly soluble in water. Methyl acetate, benzene and toluene ($R(I)$ of above 1,4 nm) form azeotropic mixtures with water. Glycerol, nitrobenzene and mercury ($R(I)$ greater than 3 nm) are practically insoluble in water. From the proposed model, we can conclude that the surface layer of the liquid is a nanostructure with size effects. It is of interest that the thickness of the surface layer of water coincides with the thickness of the surface layer of iron, cobalt and nickel. The work of adhesion and elastic constants for water and ethanol, including Young's modulus, were also found. It was established that the elasticity of water is only 100 times less than the elasticity of steel, i.e. water can be considered as an incompressible substance, and the internal friction in water is three times greater than in ethanol. It is also shown that the universal element of the geometry of spaces of liquid systems is the tetrahedron, which corresponds to sp^3 hybridization of interatomic or intermolecular bonds.

Keywords: surface layer, water, ethanol, liquid, layer thickness, cluster.

Юров Виктор Михайлович – к.ф.-м.н., доцент кафедры месторождения полезных ископаемых, НАО «Карагандинский технический университет им. А. Сагинова»

Жангозин Канат Накошевич – к.ф.-м.н., доцент, директор ТОО «ТСК-Восток»

Viktor M. Yurov – Ph. D., Associate Professor, Deposits of minerals Department, Karaganda Technical University named after A. Saginov

Kanat N. Zhangozin – Ph. D., Associate Professor, Director, LP «TSK-Vostok»

Поступила в редакцию/received: 07.08.2023; после рецензирования/reviced: 09.09.2023; принята/accepted: 13.09.2023.