

## МОЛЕКУЛЯРНА СТРУКТУРА ВОДНЮ

*Богдан СТЕФАНЮК, Ярослав СТЕФАНЮК*

Новокузнецький філіал-інститут  
“Кемеровський державний університет”,  
вул. Ціолковського 23, Новокузнецьк 654041  
Російська Федерація

Редакція отримала статтю 30 червня 2012 р.

Представлена залежність ефективної молекулярної маси водню від його динамічної в'язкості. З'ясовані в широкому діапазоні температур склад газу водню як суміші молекул  $H_2$  і полімолекул  $H_n$  ( $13 \leq n \leq 29$ ). Полімолекули представлені як наноспіралі, що забезпечують фізичні властивості газу водню. Розміри наноспіралей змінюються з температурою. При охолодженні нижче  $-40^\circ C$  наноспіралі випромінюють електромагнітні хвилі, які в нічну пору спостерігаються в атмосфері Землі як перламутрові та сріблясті хмари.

### 1. ВСТУП

Під час дослідження надмолекулярної структури газів звернено увагу на те, що водень поводить себе таким чином, що його поведінку не вдається пояснити задовільно, як для інших газів, тобто потрібні додаткові дослідження [1, 2].

Для цього ми із загальнодоступних джерел [3–7] розглянули властивості водню у порівнянні з іншими речовинами: газами, рідинами, твердими тілами, металом, які збігаються з воднем хоча б за однією фізичною властивістю (Табл. 1).

Мета роботи полягає у вивченні надмолекулярної структури водню, яка б відповідала його ефективній молекулярній масі.

### 2. ЗІСТАВЛЕННЯ ПАРАМЕТРІВ КОМПОНЕНТ АТМОСФЕРИ

Аналіз і порівняння властивостей водню та інших речовин, представлених у Табл. 1, показує, що динамічна в'язкість водню вдвічі менша, ніж азоту й кисню та майже така сама як у водяної пари, але при цьому швидкість звуку в ньому у  $3 \div 4$  рази вища, ніж у цих газах, теплопровідність відрізняється у  $7 \div 10$  разів, а теплоємність – у  $8 \div 14$  разів.

Воді водень поступається лише на 12% у швидкості звуку і в 3,2 рази у теплопровідності, але має у 3,4 рази вищу теплоємність. Порівняння параметрів водню та інертних газів відображена в Табл. 2.

Таблиця 1

## Фізичні властивості деяких речовин

Речовина	Температура $t$ , °C	Теплоємність $C$ , кДж/(кг·K)	Теплопровідність $\lambda$ , Вт/(м·K)	Швидкість звуку $v$ , м/с	Динамічна в'язкість $\mu$ , мкПа·с	Газокінетичний діаметр молекули $d$ , нм
Кисень (г)	0	0,918	0,0247	316	19,1	0,356
	20		0,0263			
Азот (г)	0	1,017	0,0243	333,6	16,6	0,37
	20	1,040	0,0257			
Водяна пара (г)	0	1,864	0,0171	401	8,8	0,28
	20	1,877	0,0182			
Водень (г)	0	14,210	0,1742	1248	8,4	0,27
	20	14,238	0,1750			
Вода (р)	0	4,217	0,561	1404	-	-
	20	4,182	0,598			
Плексиглас (т)	20		0,184	1121		
Ебоніт (т)	20		0,157±0,17	1570		
Гума тверда (т)	0÷100	1,38	0,157±0,16			
Папір звичайний (т)	20	1,54	0,14			
Свинець (т)	0	0,128	35,1	1262		
	20			1200		

\*(г) – газ, (р) – рідина, (т) – тверда речовина

Таблиця 2

## Склад атмосфери залежно від висоти

Висота над рівнем моря $h$ , км	Температура $t$ , °C	Тиск $p$ , кПа	Хімічний склад, % об'ємні				
			Азот N	Кисень O	Аргон Ar	Гелій He	Водень H
0	+15	101,35	78,08	20,95	0,93	0,00046	0,00005
5	-17,5	54	77,89	20,95	0,94	...	0,01
10	-50	26	78,02	20,99	0,94	...	0,02
20	-60	5,5	81,24	18,10	0,59	...	0,04
25...30 <sup>*)</sup>	-60...-50	1,2...1,0	73...70	16...14	~0,5	~0,1	10...15
70...85 <sup>**)</sup>	-55...-85	0,058...0,045	26...20	9...4	~0,1	~0,2	65...75
100	-64	0,009	2,79	0,11	-	0,56	96,31

\*) Область перламутрових хмар;

\*\*\*) Область сріблястих хмар.

На великих висотах (понад 20 км) “легкий” водень у тропосфері стає суттєво важчим за гелій.

### 3. ПОБУДОВА СТРУКТУРИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДНЮ

Динамічна в'язкість газу є інтегральною властивістю його структури. Опіраючись на динамічну в'язкість, побудуємо молекулярну структуру водню. Для цього використаємо методику, описану в [1, 2, 8, 9], що дає змогу через динамічну в'язкість знайти ефективну молекулярну масу в атомних одиницях маси (а.о.м.), а також у першому наближенні знайти структурний вміст компонентів газу при заданих температурах. Результати обчислень наведено в Табл. 3.

Таблиця 3

Вихідні дані і ефективна молекулярна маса водню і його структурний склад

Температура $t$ , °C	Динамічна в'язкість $\mu$ , мкПа·с					$M_{\text{ef}}$ водню а.о.м.	Структурний склад, %	
	Опорні точки				Водень Н		Н <sub>2</sub>	і $i_{\text{до}+2}$
	M = 0	CO <sub>2</sub> M = 44	(CO) <sub>2</sub> M = 56	(NO) <sub>2</sub> M = 60				
100	7,7	18,0	20,8	21,7	10,3	11	18,2	81,8
60	6,1	16,4	19,2	20,1	9,6	15	13,3	86,7
40	5,2	15,5	18,3	19,2	9,2	17	11,7	88,3
20	4,3	14,6	17,4	18,3	8,8	19	10,5	89,5
0	3,5	13,8	16,6	17,5	8,4	21	9,5	90,5
-20	2,6	12,9	15,7	16,6	8,0	23	8,7	91,3
-40	1,8	12,1	14,9	15,8	7,6	25	8,0	92,0
-60	0,8	11,1	13,9	14,8	7,2	27	7,4	92,6

Як наслідок, отримаємо залежність ефективної маси водню від температури

$$M(t) = M|_{t=0} - \alpha \cdot t, \quad (1)$$

де  $t$  – температура газу, °C;  $-60^\circ\text{C} \leq t \leq 100^\circ\text{C}$ ;

$\alpha$  – структурно-температурний градієнт  $dn/dt$ ,  $\alpha = 0,1$  а.о.м./°C;

$M(t=0)$  – ефективна маса водню при температурі  $0^\circ\text{C}$ , що дорівнює 21 а.о.м.

Припускаємо, що газ водень складається переважно з двох компонент: Н<sub>2</sub> і Н<sub>M<sub>ef</sub>+2</sub>.

Звичайно, виникає запитання: якою є структура водню при Н<sub>M<sub>ef</sub>+2</sub>? Які зв'язки забезпечують стійкість полімолекули водню?

Прототипом структури слугували фулерени – молекули вуглецю з парною кількістю атомів, зокрема, С<sub>24</sub>, С<sub>28</sub>, С<sub>32</sub> і фулеренові нанотрубки [10].

Однак завдання насправді складніше, бо водень одновалентний, а вуглець чотиривалентний. При цьому треба пояснити температурну залежність і високу теплоємність водню.

Як відомо, водневі зв'язки забезпечують високу теплоємність води: 4,18 кДж/(кг·К) [11]. Теплоємність водню 14,21 кДж/(кг·К) може бути забезпечена сильнішими, а саме, валентними зв'язками.

Таким чином, слід говорити про полімолекулярну структуру водню. Її елементами є наноспіралі. Діаметр наноспіралі  $d_c$ , крок –  $d_c$ , при  $\Phi = 1,61803\dots$  (число Фібоначчі).

Кількість атомів водню в наноспіралі

$$n = n_1 \cdot n_2, \quad (2)$$

де  $n$  – кількість усіх атомів водню в спіралі;

$n_1$  – кількість витків спіралі;

$n_2$  – кількість атомів водню у витку.

Приймаємо, що висота наноспіралі дорівнює її діаметру:

$$\begin{aligned} h_c &= d_c \\ &= 2r_c, \end{aligned} \quad (3)$$

де  $r_c$  – радіус наноспіралі.

Інтервал між витками наноспіралі не менший за  $2r_0\Phi^{-1}$ , при  $\Phi^{-1} = 0,61803$ ;  $r_0$  – радіус атома водню.

Кількість витків наноспіралі

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{h + 2r_0\Phi^{-1}}{2r_0 + 2r_0\Phi^{-1}} \\ &= \frac{2r_c + 2r_0\Phi^{-1}}{2r_0 + 2r_0\Phi^{-1}} \\ &= \frac{r_c\Phi^{-1} + \Phi^{-2}}{r_0}. \end{aligned} \quad (4)$$

Кількість атомів водню в одному витку наноспіралі

$$\begin{aligned} n_2 &= \frac{2\pi(r_c - r_0)}{S2r_0} \\ &= \frac{\pi}{s} \left( \frac{r_c}{r_0} - 1 \right), \end{aligned} \quad (5)$$

де  $s = 0,94$  – коефіцієнт, що враховує перекриття хвильових функцій атомів водню на 6 %.

Підставивши вирази (4) і (5) в (2), отримаємо

$$n = \left( \frac{r_c}{r_0}\Phi^{-1} + \Phi^{-2} \right) \left( \frac{r_c}{r_0} - 1 \right), \quad (6)$$

що, по суті, є квадратним рівнянням відносно невідомого відношення  $r_c/r_0$ :

$$\left( \frac{r_c}{r_0} \right)^2 - \frac{r_c}{r_0} (1 - \Phi^{-1}) - \left( \Phi^{-1} + \frac{\Phi s}{\pi} n \right) = 0. \quad (7)$$

Додатний корінь цього рівняння дає залежність радіуса наноспіралі від кількості атомів водню  $n$ :

$$r_c = r_0 \left\{ \frac{1 - \Phi^{-1}}{2} + \sqrt{\left( \frac{1 - \Phi^{-1}}{2} \right)^2 + \Phi^{-1} + \frac{\Phi s}{\pi} n} \right\}. \quad (8)$$

Підставивши числові значення, отримаємо

$$r_c = 0,037707 \left\{ 0,1910 + \sqrt{0,6545 + 0,4841n} \right\}. \quad (9)$$

Обчислені розміри наноспіралей для різних температур подані в Табл. 4.

Таблиця 4

Розміри наноспіралей водню

Температура $t$ , °C	Кількість атомів водню у спіралі, $n$		Внутрішній радіус наноспіралі $r_c$ , нм	Діаметр наноспіралі $d_c$ , нм
	$M_{ef}$	$M_{ef}+2$		
100	11	13	0,0678	0,2096
60	15	17	0,0806	0,2352
40	17	19	0,0864	0,2468
20	19	21	0,0920	0,2580
0	21	23	0,0974	0,2687
-20	23	25	0,1025	0,2790
-40	25	27	0,1074	0,2888
-60	27	29	0,1122	0,2984

Вони відповідають газодинамічному діаметру водню (Табл.1) з похибкою не більше 5 %.

Зі зниженням температури наноспіраль “розбухає” і кількість атомів у ній збільшується, при цьому вона віддає теплову енергію. При підвищенні температури процес відбувається в зворотному напрямку – наноспіраль “стискається”, вбирає в себе енергію на розрив валентного зв’язку чергового “кінцевого” атома.

Віддача енергії при охолодженні та збільшенні довжини наноспіралі супроводжується зміною орбіт електронів, що лумовлює випромінювання електромагнітних хвиль.

Беручи до уваги дані Табл. 2 і висоту підняття водяної пари зі структурою димерів до 12 км [8], доходимо висновку, що перламутрові хмари на висоті 25–30 км і сріблясті хмари на висоті 70–85 км є водневими хмарами, в яких водень охолоджується у нічну пору від  $-40^\circ\text{C}$  до  $-70^\circ\text{C}$ ... $-80^\circ\text{C}$  і світиться у відповідних ділянках спектра.

Можна припустити, що водень, виходячи із надр зірок у космічний простір, охолоджується і віддає енергію, створюючи наноспіралі, й таким чином переносить енергію в космосі поряд з електромагнітними та іншими полями [12].

#### 4. ВИСНОВКИ

1. На основі динамічної в’язкості з’ясовано, що газ водень в діапазоні температур  $-60^\circ\text{C} \div +100^\circ\text{C}$  є сумішшю молекул  $\text{H}_2$  і полімолекул  $\text{H}_n$  ( $n = 13, 14, \dots, 29$ ).

2. Полімолекула водню – це наноспіраль атомів, об'єднаних валентними зв'язками з перекриттям хвильових функцій атомів не менш ніж на 6 %.
3. Наноспіралі забезпечують високу швидкість звуку, високу теплоємність та інші фізичні властивості молекулярного водню.
4. Зі зниженням температури розміри і відсоткова частка наноспіралей у складі газу збільшується, а з підвищенням температури – навпаки.
5. Свічення в нічному небі стратосфери і мезосфери, яке спостерігається як перламутрові та сріблясті хмари, є випромінюванням водневих наноспіралей, які охолоджуються вночі після нагрівання удень.
6. У космічному просторі наноспіралі водню є суттєвим переносником енергії.

## Література

- [1] *Стефанюк Б.М., Стефанюк Я.Б.* Вязкость как интегральное свойство структуры газов. // Материалы VIII международной конференции “Природные условия, история и культура Западной Монголии и сопредельных регионов” (Горно-Алтайск, 19-23 сент. 2007 г.) том II. Горно-Алтайск: РИО Горноалтайского госун-та, 2007. 292–295.
- [2] *Стефанюк Б.М., Стефанюк Я.Б.* В'язкість як інтегральна властивість структури газів // Вісн. Прикарпат. нац. ун-ту ім. Василя Стефаника. Сер. Хімія. 2010. Вип. 9. 40–43.
- [3] Краткий энциклопедический словарь. М.: Большая Российская Энциклопедия; Рипол классик, 2000. Т. 1. 40–43.
- [4] *Викторов М.М.* Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты. Л.: Химия, 1977. 360 с.
- [5] *Дубровский И.М., Егоров Б.В., Рябошапка К.П.* Справочник по физике. К.: Наукова думка, 1986. 558 с.
- [6] *Кошкин Н.И., Шашкевич М.Г.* Справочник по электронной физике. М.: Наука, 1982. 208 с.
- [7] *Николайкин Н.И., Николайкина Н.Е., Мелихова О.П.* Экология. М.: Дрофа, 2005. 622 с.
- [8] *Стефанюк Б.М., Сенкус В.В., Стефанюк Я.Б.* Надмолекулярная структура пара при температуре менее 100 °С и ее влияние на процессы в тропосфере // Материалы VIII междунар. конф. “Природные условия, история и культура Западной Монголии и сопредельных регионов” (Горно-Алтайск, 19–23 сент. 2007 г.) Т. 2. Горно-Алтайск: РИО Горноалтайского госун-та, 2007. 296-301.

- [9] *Стефанюк Б.М., Стефанюк Я.Б., Сенжус В.В.* Надмолекулярная структура газов тропосферы // Материалы VIII междунар. конф. “Природные условия, история и культура Западной Монголии и сопредельных регионов” (Горно-Алтайск, 19-23 сент. 2007 г.) Т. 2. Горно-Алтайск: РИО Горноалтайского госун-та, 2007. 301-305.
- [10] *Довгий Я.О.* Чарівне явище надпровідність. Львів: Євросвіт, 2000. 440 с.
- [11] *Новиков Г.И.* Основы общей химии. М.: Высш. шк., 1988. 431 с.
- [12] *Оганесян Т.* Невидимая рука мироздания // Эксперт. № 34. 2001.

## MOLECULAR STRUCTURE OF HYDROGEN

*Bogdan STEFANYUK, Yaroslav STEFANYUK*

Novokuznetsk Institute (branch) of the “Kemerovo State University”  
23 Tsyolkovsky Str., Novokuznetsk 654041, RF

The dependence of the effective molecular weight of hydrogen on its dynamic viscosity is presented. The structure of gas of hydrogen as mixes of molecules  $H_2$  and polymolecules  $H_n$  ( $13 \leq n \leq 29$ ) has been established in a wide range of temperatures. Polymolecules are presented as nanospirales, which provide physical properties of gas of hydrogen. The sizes of nanospirales change with temperature. At cooling below  $-40^\circ C$ , nanospirales radiate electromagnetic waves which in night-time are observed in the atmosphere of the Earth as nacreous and noctilucent clouds.