

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.01.055>

УДК 550.26:541.18

С.В. Кушнір

Інститут геології і геохімії горючих копалин НАН України, Львів

E-mail: igggk@mail.lviv.ua

Молекулярна модель будови інтерфейсу повітря/вода та її вплив на швидкість випаровування води (фізико-хімічний аналіз)

Представлено академіком НАН України Є.Ф. Шнюковим

Показано, що на поверхні води плоскі циклічні кластери N4 і N5 можуть за допомогою додаткових молекул H₂O формувати плоску сітку водневих зв'язків. Взаємодія цієї електронейтральної сітки з об'ємною водою спричиняє активну адсорбцію іонів H₃O⁺, виникнення подвійного електричного шару і переорієнтацію всіх нез'язаних груп ОН кластерів у бік рідкої фази. У результаті на поверхні інтерфейсу повітря/вода виникає негативний структурний заряд. Сформована таким чином поверхнева молекулярно-кластерна плівка інтерфейсу має досить високу стійкість і здатність адсорбувати іони H₃O⁺ та катіони різних металів. Вода повинна випаровуватися через достатньо великі "вікна" в поверхневій кластерній сітці.

Ключові слова: вода, інтерфейс повітря/вода, молекулярна модель, кластери, швидкість випаровування.

З початку ХХІ ст. інтенсивно досліджується структура поверхні води, яка відіграє важливу роль у багатьох природних і технологічних процесах: випаровуванні і конденсації води, утворенні аерозолів, формуванні атмосферних опадів, флотаційних процесах і т.п. [1–3]. Проте досі не з'ясовано, як збудована ця поверхня на контакті з повітрям, чому вона заряджена негативно, а краплинки аерозолів, що утворюються в процесі барботування газів, несуть позитивний заряд і мають підвищену кислотність. Результати попередніх досліджень [4, 5] дали змогу наблизитись до вирішення цих питань. Завдання роботи – побудувати таку молекулярну модель структури інтерфейсу повітря/вода, яка зможе задовільно пояснити усі його особливості.

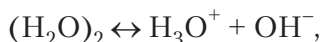
Фізико-хімічний аналіз змін ентропії та інших структурно залежних властивостей води під час нагрівання показав, що рідка вода може існувати у чотирьох структурних типах, які відрізняються числом водневих зв'язків (Н-зв'язків) основної маси молекул H₂O. Максимальне число цих зв'язків (чотири!) реалізується лише у твердій воді (лід). У рідкому стані це число (*k*) завжди менше і змінюється під час нагрівання в послідовності 3–2–1–0 з утворенням різних типів структур [4].

У випадку *k* = 3 (0–100 °С) виникають об'ємні кластери (H₂O)_{*n*} з *n* = 6 ÷ 20 і більше та їх полімери, які формують явно неоднорідну "мерехтливу" структуру вод типу І. Окремі

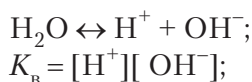
кластери тут набувають форми, наближеної до правильних багатогранників, грані яких мають вигляд 3-4-5-6-кутників. Різна орієнтація молекул H_2O у цих кластерах обумовлює існування величезної кількості їх ізомерів, які мають дуже близькі енергії комплексоутворення. Це дуже ускладнює досягнення водою структурної рівноваги і дає їй можливість довго перебувати в активованих станах [6].

У випадку $k = 2$ (100–240 °С) утворюються плоскі циклічні кластери $N3$, $N4$ і $N5$, які і є основними компонентами вод типу II. На поверхні вони можуть формувати плоску кластерно-полімерну сітку Н-зв'язків, яка визначає величину поверхневого натягу води. Оскільки на кривих ентропії пароутворення і поверхневого натягу при 100 °С немає ніяких змін, можна припустити, що таку ж структуру має поверхня і у водах типу I.

У холодних і перегрітих водах типів I і II завжди є невеликі домішки димерів $(\text{H}_2\text{O})_2$ і мономерів H_2O , як неминучих дефектів цих диполічних конденсованих структур. Такі частки під впливом вищих температур стають основними компонентами для вод типу III (димери, при 240–320 °С) і типу IV (мономери, при 320–376 °С). Справедливість наведеної типізації підтверджує факт екстремальної температурної залежності величини іонного добутку води (K_b), який досягає максимальної величини при 250 °С, тобто в умовах, коли основним компонентом води стають димери, які і є джерелом появи у воді іонів H^+ (у вигляді H_3O^+) та OH^- [7]:



спрощено



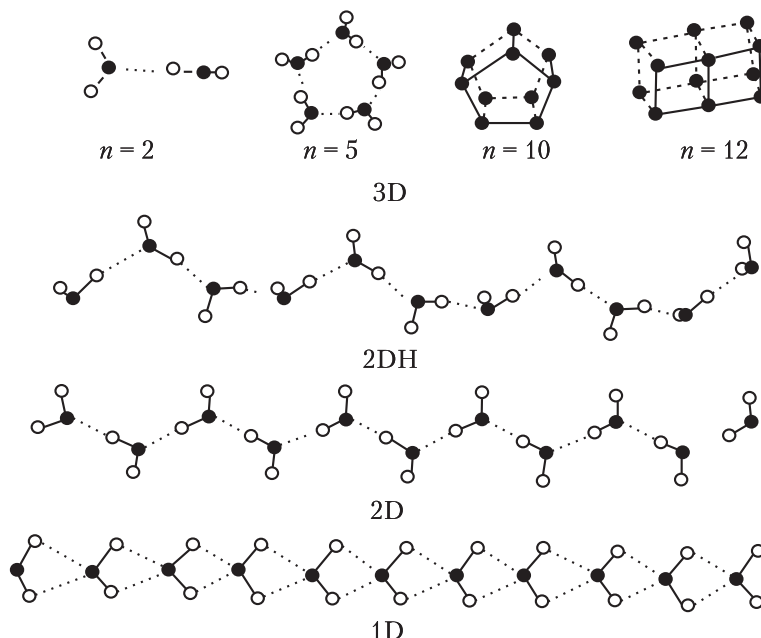
при 25 °С $K_b = 10^{-14}$, при 250 °С $K_b = 10^{-11,2}$.

Оскільки $\text{pH} = -\log[\text{H}^+]$, а в нейтральній воді $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$, то $\text{pH}_{25} = 7,0$, а $\text{pH}_{250} = 5,6$. Тому самочинне зменшення рН у водах I і II типів завжди можна трактувати як ознаку збільшення їх структурної температури.

Описаний вище механізм кластеризації не є єдино можливим. У роботі [8] показано, що за звичайних умов можуть існувати й інші механізми, які зумовлюють утворення лінійних ланцюгів із молекул H_2O (рис. 1). Використаний нами механізм описує схема 3D. Схеми 1D і 2D описують різні варіанти утворення прямих ланцюгів, а схема 2DH – скрученого у спіраль ланцюга з довжиною ланки спіралі в шість молекул H_2O . Розраховані для усіх цих схем величини енергії зв'язків (E_H) наведені в таблиці для рідкого і газоподібного стану води. Згідно з одержаними даними, механізм 3D є оптимальним, оскільки забезпечує найвищі значення E_H . Енергія Н-зв'язків під час утворення ланцюгів набагато менша, особливо у випадку 1D, який у рідкій воді виявляється енергетично невигідним. Механізми 2D і 2DH достатньо екзотермічні, особливо в газовій фазі, тому повинні відігравати важливу роль у формуванні фантастичних фігур сніжинок під час замерзання парів води.

Але головним, що впливає з аналізу даних таблиці, є сильний вплив рідкої фази на енергію Н-зв'язку: значення E_H для рідини практично вдвічі менші, ніж для газу. Це означає, що всі структури кластерів типу 3D у водному середовищі сильно ослаблюються під впливом навколишніх молекул води. Тому є всі підстави очікувати, що на поверхні води,

Рис. 1. Механізми структурування води за нормальних умов (за [8]). У випадку 3D утворюються плоскі циклічні і об'ємні кластери; під впливом інших механізмів виникають лінійні асоціати різного типу. Для структур з $n = 10, 12$ показано положення тільки атомів кисню



де цей вплив буде вдвічі меншим, величини E_H матимуть якісь проміжні значення і поверхневі Н-зв'язки стануть набагато стійкішими від об'ємних.

Причини появи електричного заряду на поверхні води досі залишаються незрозумілими. Одні дослідники вважають, що цей заряд виникає внаслідок

односторонньої орієнтації диполів поверхневих молекул H_2O атомами кисню в бік газової фази і може бути тільки негативним. Інші переконують, що це результат адсорбції іонів на поверхні води, тому заряд буває і позитивним. На рис. 2 наведені важливі результати прямих замірів електрокінетичного потенціалу води [9]. Для чистої води (див. рис. 2, *в*) цей потенціал дуже чутливий до змін рН. Введення у воду невеликих концентрацій $NaCl$ (до 10^{-4} моль/л) практично не впливає на поверхневий заряд, але якщо $[NaCl] > 10^{-3}$ моль/л, то його значення може знизитися до нуля. Згідно з іншими даними [10, с. 207], катіони дво- і тривалентних металів знижують ζ -потенціал набагато швидше і легко переводять його в

Енергія комплексування (E_H , ккал/моль) у розрахунку на одну молекулу H_2O в кластерах води, утворених за різними механізмами для газової (GP) і рідкої (SP) фази [8]

n	1D		2D		2DH		3D	
	GP	SP	GP	SP	GP	SP	GP	SP
2	-3,68	0,27	-6,88	-3,34	<i>a</i>	<i>a</i>	-7,40	-3,67
3	-4,15	0,26	-7,38	-3,61	<i>a</i>	<i>a</i>	-10,80	-3,02
4	-4,42	0,25	-7,85	-3,72	<i>a</i>	<i>a</i>	-12,65	-5,00
5	-4,59	0,27	-8,17	-3,78	<i>a</i>	<i>a</i>	-12,56	-5,31
6	-4,71	0,27	-8,39	-3,82	-9,28	-4,17	-12,18	-4,40
7	-4,80	0,26	-8,56	-3,86	-9,42	-4,20	-12,73	-5,02
8	-4,86	0,26	-8,70	-3,87	-9,53	-4,22	-13,67	-5,23
9	-4,92	0,27	-8,80	-3,88	-9,62	-4,23	-13,59	-5,50
10	-4,96	0,27	-8,88	-3,89	-9,70	-4,24	-13,70	-5,59

Примітка. n – число молекул H_2O в кластері, a – пропуски, пов'язані з тим, що для спіральних кластерів прийнято $n \geq 6$.

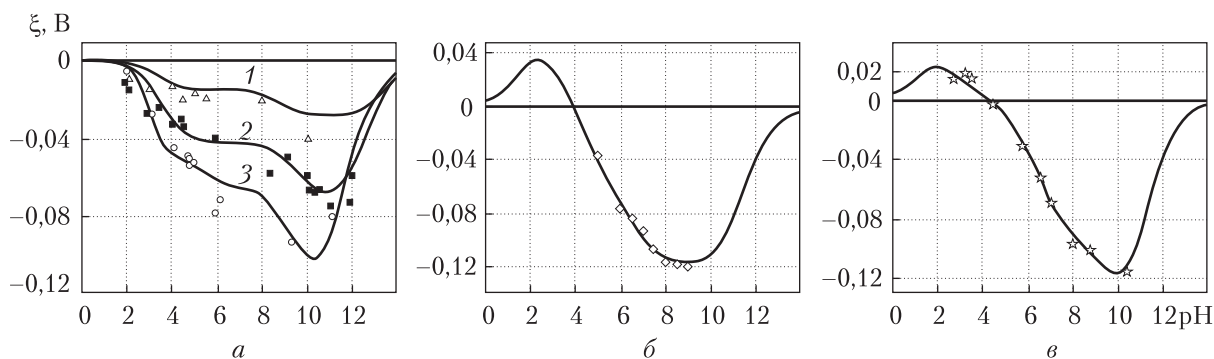


Рис. 2. Вплив рН на дзета-потенціал води та водних розчинів NaCl [9]: *a* – розчини NaCl: 1 – 10^{-1} М; 2 – 10^{-2} М; 3 – 10^{-3} М; *б* – розчин 10^{-4} М NaCl; *в* – вода. Експериментальні результати відмічені фігурними значками. Лінії відповідають штучній моделі автора, в якій використані змінні коефіцієнти адсорбції

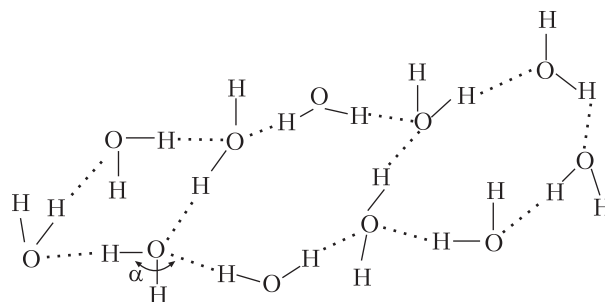
позитивну область. Усе це свідчить про те, що поверхня води має сильну адсорбційну здатність щодо катіонів. Але невідомо, як це пов'язано з будовою інтерфейсу повітря/вода.

Наведені вище факти, а також відомі властивості елементарних компонентів води (H_2O , H_3O^+ , OH^-) за даними [1, 6] дають підставу стверджувати, що в приповерхневому шарі води наявні там плоскі циклічні кластери *N4* і *N5* самочинно полімеризуються за схемою рис. 3. Через особливості молекулярної структури *N4* і *N5* вони не можуть зв'язуватися в одній площині безпосередньо, але за допомогою двох донорних Н-зв'язків додаткових молекул H_2O роблять це дуже легко. На рис. 3 показано випадок, коли між *N4* і *N5* виникає одразу два таких зв'язки і формується нове шестикутне плоске кільце *N6*. Проте ймовірність утворення між кластерами одинарного зв'язку набагато більша, ніж подвійного. Тому створена таким чином сітка буде сформована в основному простими кластерами *N4* і *N5*, між якими буде багато великих “вікон”.

В утвореній за схемою рис. 3 плоскій сітці Н-зв'язків половина незв'язаних груп ОН кластерів води спрямована вгору, а інша половина – вниз. У такій структурі усі ефективні заряди атомів Н і О взаємно компенсуються і сітка залишається електрично нейтральною. Але на поверхні води ця структура буде зазнавати сильного впливу рідкої фази, особливо присутніх там іонів гідроксонію H_3O^+ . У першу чергу ці іони будуть утворювати дуже вигідні* донорні Н-зв'язки з “лежачими” молекулами H_2O сітки. У другу чергу вони будуть фізично адсорбуватися на спрямованих вниз ОН-групах, оскільки тривалість життя їх в цьому стані мусить значно перевищувати аналогічний стан для нейтральних молекул H_2O (за [11] для H_3O^+ $\Delta G_{\text{адс}}^0 < 0$). У результаті під сіткою кластерів виникає подвійний електричний шар (ПЕШ), в якому іони H_3O^+ відіграють роль внутрішньої, а іони OH^- – зовнішньої обкладки (дифузна область). Електричне поле ПЕШ впливає і на спрямовані вверх групи ОН-кластерів, стимулює їх переорієнтацію в бік рідкої фази, де вони також будуть адсорбувати іони H_3O^+ . Після усіх цих змін на поверхні кластерної сітки залишаються лише атоми $\text{O}^{\delta-}$ води, ефективний заряд яких ($-0,67$ е. о.) компенсується лише частково і поверхня виявляється зарядженою негативно.

* ЕН-зв'язків за [11]: $\text{H}_2\text{O} \dots \text{H}_2\text{O} - 7,4$ кДж/моль; $\text{H}_3\text{O}^+ \dots \text{H}_2\text{O} - 18,3$ кДж/моль.

Рис. 3. Схема формування нейтральної кластерної сітки водневих зв'язків на поверхні води. Кільця кластерів N4 і N5 та зв'язуючі їх молекули H_2O знаходяться в одній площині. Водневі зв'язки позначені пунктиром. Кут $\alpha = 150^\circ$



Якщо наш аналіз відповідає дійсності, то максимальний негативний заряд на поверхні води має виникнути тоді, коли всі вільні групи OH поверхневої сітки кластерів будуть орієнтовані в бік рідкої, а атоми $\text{O}^{\delta-}$ — газової фази. Із рис. 2 видно, що такий екстремум виникає при рН 10, а це виглядає дивним. Але ця неузгодженість є позірною, бо зниження рН стосується об'ємної води, а вода інтерфейсу мусить бути набагато кислішою. Згідно з [9], збільшення концентрації іонів H^+ там може досягати декількох порядків. Якщо прийемо величину збільшення на три порядки, то при рН 10 в об'ємі його значення в інтерфейсі становитиме лише 7, отже, середовище буде практично нейтральним. Покажемо, що запропонована модель молекулярної будови інтерфейсу дає змогу просто пояснити усі зміни поверхневого заряду води під впливом рН та солей металів.

Як впливає з рис. 2, відхилення рН води від рН 10 як у кислий, так і в лужний бік веде до зменшення ζ . Судячи з характеру відповідних кривих, механізми впливу H_3O^+ і OH^- мусять бути різними. Крива впливу OH^- (рН > 10) явно має вигляд, характерний для процесів нейтралізації слабких кислот лугами. Тому можна вважати, що іони OH^- витрачаються на нейтралізацію в інтерфейсі іонів H_3O^+ . Це повинно спричинити зворотню переорієнтацію частини окластерних груп OH у бік газової фази і відповідного зменшення дзета-потенціалу. При рН 13 переорієнтація завершується і поверхнева кластерна сітка мала б стати нейтральною. Тому збереження слабого негативного заряду на поверхні при рН > 13 слід приписувати вже адсорбції іонів OH^- .

Вплив H_3O^+ значно складніший. У разі зменшення рН в інтервалі 10–4 крива ζ за динамікою відповідає процесам зміщення іонно-адсорбційної рівноваги. Тому можна вважати, що зі збільшенням концентрації іонів H_3O^+ у воді зростає їх додаткова адсорбція на нижньому боці поверхневої сітки кластерів. При цьому відбувається поступова компенсація негативного поверхневого заряду. Менша швидкість змін ζ у цьому випадку пояснюється тим, що на адсорбцію тут витрачається лише частина введених іонів H_3O^+ . Інша їх частина витрачається на реорганізацію структури об'ємної води відповідно до вимог нової іонно-адсорбційної рівноваги в інтерфейсі. При рН 4 поверхневий структурний заряд нейтралізується повністю (ізоелектрична точка), але структура поверхневої сітки кластерів залишається односторонньо орієнтованою. При рН < 4 поверхневий заряд стає слабо позитивним, що можна пояснити лише адсорбцією іонів H_3O^+ на поверхневих атомах $\text{O}^{\delta-}$. Сильне зниження дзета-потенціалу води під впливом розчинених солей металів свідчить про те, що їх катіони також адсорбуються на поверхневій кластерній сітці. Тому чим більший заряд катіонів, тим швидше зменшується негативний поверхневий заряд, а іони дво- і тривалентних металів легко змінюють цей заряд на позитивний. Оскільки при цьому рН розчинів не змі-

нюється, можна стверджувати, що адсорбовані в інтерфейсі іони H_3O^+ катіонами металів у розчин не витісняються. Отже, сформована самочинно у воді поверхнева структура інтерфейсу досить стійка і здатна відігравати роль адсорбенту для катіонів металів.

Згідно з результатами дослідження, поверхнева сітка плоских кластерів води поводить себе як окремий фізичний об'єкт з високими адсорбційними властивостями. Тому не виключено, що в певних умовах ця сітка може сформувати справжню полімолекулярну плівку з високою стабільністю. Таку можливість підтверджують і спостереження за поведінкою бульбашок повітря на воді під час теплих літніх дощів. Виявляється, що тривалість існування цих бульбашок поступово зростає з часом, тобто із насиченням повітря парами води.

Більшість дослідників вважає, що вода може випаровуватися тільки у вигляді окремих молекул H_2O , які одержали від оточення енергію, достатню для розриву усіх своїх зв'язків з навколишніми структурами (енергія активації). Імовірність появи таких активних молекул у поверхневій кластерній сітці дуже мала. Тому слід очікувати, що випаровуватися буде об'ємна вода через достатньо великі "вікна" в цій сітці. Через малу швидкість досягнення структурної рівноваги будова поверхні води і характер цих "вікон" дуже мінливі. Тому мінливою повинна бути і проникність поверхневої кластерної сітки для парів води. Експериментальні дані з цим висновком узгоджуються. Коефіцієнт випаровування води близький до одиниці для свіжоприготовленої проби і швидко зменшується з наближенням до стану термодинамічної рівноваги під час насичення парів [13].

Проведений аналіз показав, що запропонована схема молекулярної будови інтерфейсу повітря/вода може задовільно пояснити усі особливості поверхні води і заслуговує на подальші дослідження. Разом з тим виявлено, що природа електричного заряду на поверхні води залежить від величини рН: в діапазоні $4 < \text{pH} < 13$ вона структурна, а при $\text{pH} < 4$ і $\text{pH} > 13$ — іонна. Це і є відповідь на питання, яке досі не можуть узгодити прихильники структурної іонної теорії поверхневого потенціалу води.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Chaplin M. Theory vs experiment: what is the surface charge of water? *Water*. 2009. № 1. P. 1–28.
2. Enami S., Stewart L.A., Hoffmann M.R., Colussi A.J. Superacid chemistry on mildly acidic water. *J. Phys. Chem. Lett.* 2010. **1**, № 24. P. 3488–3493. doi: <https://doi.org/10.1021/jz101402y>
3. Azarkish H., Behzadmehr A., Sheikholeslami T.F., Sarvari S.M.H., Fréchette L.G. Water evaporation phenomena on micro and nanostructured surfaces. *Int. J. Therm. Sci.* 2015. **90**. P. 112–121. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2014.12.005>
4. Кушнір С. Структура і властивості чистої води за різних термобаричних умов (фізико-хімічний аналіз). *Мінералог. зб.* 2012. № 62, вип. 2. С. 236–245.
5. Кушнір С.В. Причини барботажного хімічного ефекту і диференціації іонів при утворенні морських аерозолів (фізико-хімічний аналіз). *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2015. № 7. С. 91–98. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.07.091>
6. Киров М.В. Структура полиэдрических кластеров воды. *Журн. структ. химии.* 1993. **34**, № 4. С. 77–82.
7. Bandura A.V., Lvov S.N. The ionization constant of water over wide ranges of temperature and density. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2006. **35**, № 1. P. 15–30.
8. Neela Y.I., Mahadevi A. S., Sastry G.N. Hydrogen bonding in water clusters and their ionized counterparts. *J. Phys. Chem. B.* 2010. **14**. P. 17162–17171
9. Manciu M., Ruckenstein E. Ions near the air/water interface. II: Is the water/air interface acidic or basic? Predictions of a simple model. *Colloids Surf. A. Physicochem. Eng. Aspects.* 2012. **404**. P. 93–100. doi: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2012.04.020>

10. Фридрихсберг Д.А. Курс коллоидной химии. Ленинград: Химия, 1984. 367 с.
11. Markovitch O., Agmon N. Structure and energetics of the hydronium hydration shells. *J. Phys. Chem. A*. 2007. **111**, № 12. P. 2253–2256. doi: <https://doi.org/10.1021/jp068960g>
12. Кушнір С.В., Кость М.В., Козак Р.П., Сахнюк І.І. “Поверхневе кипіння” з сольовим ефектом як новий вид переходу солей в газову фазу із водних розчинів. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2017. № 12. С. 68–72. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.12.068>
13. Проблеми фізики хмар і активних впливів на метеорологічні процеси: Салаєв А.Н. (ред.). Київ: Наук. думка, 2014. 173 с.

Надійшло до редакції 03.09.2018

REFERENCES

1. Chaplin, M. (2009). Theory vs experiment: what is the surface charge of water? *Water*, No. 1, pp. 1-28.
2. Enami, S., Stewart, L.A., Hoffmann, M.R. & Colussi, A.J. (2010). Superacid chemistry on mildly acidic water. *J. Phys. Chem. Lett.*, 1, No. 24, pp. 3488-3493. doi: <https://doi.org/10.1021/jz101402y>
3. Azarkish, H., Behzadmehr, A., Sheikholeslami, T. F., Sarvari, S. M. H. & Fréchette, L. G. (2015). Water evaporation phenomena on micro and nanostructured surfaces. *Int. J. Therm. Sci.*, 90, pp. 112-121. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2014.12.005>
4. Kushnir, S. (2012). Structure and properties of clear water under different thermobaric conditions (physical-chemical analysis). *Mineralog. zb.*, No. 62, Iss. 2, pp. 236-245 (in Ukrainian).
5. Kushnir, S. V. (2015). Reasons for the bubbling chemical effect and differentiation of ions in the formation of marine aerosols (physico-chemical analysis). *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 7, pp. 91-98 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.07.091>
6. Kirov, M.V. (1993). Structure of polyhedral water clusters. *Zhurn. strukturnoy himii*, 34, No. 4, pp. 77-82 (in Russian).
7. Bandura, A. V. & Lvov, S. N. (2006). The ionization constant of water over wide ranges of temperature and density. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 35, No. 1, pp. 15-30.
8. Neela, Y. I., Mahadevi, A. S. & Sastry, G. N. (2010). Hydrogen bonding in water clusters and their ionized counterparts. *J. Phys. Chem. B.*, 114, pp. 17162-17171.
9. Manciu, M. & Ruckenstein, E. (2012). Ions near the air/water interface: II. Is the water/air interface acidic or basic? Predictions of a simple model. *Colloids Surf. A. Physicochem. Eng. Aspects.*, 404, pp. 93-100. doi: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2012.04.020>
10. Fridrihсberg, D.A. (1984). Course of colloid chemistry. Leningrad: Himiya (in Russian).
11. Markovitch, O. & Agmon, N. (2007). Structure and energetics of the hydronium hydration shells. *J. Phys. Chem. A.*, 111, No. 12, pp. 2253-2256. doi: <https://doi.org/10.1021/jp068960g>
12. Kushnir, S. V., Kost', M. V., Kozak, R. P. & Sachnuyk, I. I. (2017). “Surface boiling” with the salt effect as a new kind of the transition of salts in the gas phase from aqueous solutions. *Dopov. Nac. akad. Nauk Ukr.*, No. 12, pp. 68-72 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.12.068>
13. Salaiev, A. N. (Ed.) (2014). Problems of cloud physics and active influence on meteorological processes. Kiev: Naukova dumka (in Ukrainian).

Received 03.09.2018

С.В. Кушнір

Институт геологии и геохимии полезных ископаемых НАН Украины, Львов
E-mail: igggk@mail.lviv.ua

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ СТРОЕНИЯ ИНТЕРФЕЙСА ВОЗДУХ/ВОДА И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА СКОРОСТЬ ИСПАРЕНИЯ ВОДЫ (ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ)

Показано, что на поверхности воды плоские циклические кластеры N_4 и N_5 могут с помощью дополнительных молекул H_2O формировать плоскую сетку водородных связей. Взаимодействие этой электронной нейтральной сетки с объемной водой приводит к активной адсорбции ионов H_3O^+ , возникновению двойного электрического слоя и переориентации всех несвязанных групп ОН кластеров в сторону жидкой

фазы. В результате на поверхности интерфейса воздух/вода возникает отрицательный структурный заряд. Сложившаяся таким образом поверхностная молекулярно-кластерная пленка интерфейса имеет достаточно высокую устойчивость и способность адсорбировать ионы H_3O^+ и катионы различных металлов. Вода должна испаряться через достаточно большие «окна» в поверхностной кластерной сетке.

Ключевые слова: вода, интерфейс воздух/вода, молекулярная модель, кластеры, скорость испарения.

S.V. Kushnir

Institute of Geology and Geochemistry of Combustible Minerals of the NAS of Ukraine, Lviv

E-mail: igggk@mail.lviv.ua

A MOLECULAR MODEL OF THE AIR/ WATER INTERFACE
STRUCTURE AND ITS INFLUENCE ON THE WATER
EVAPORATION SPEED (PHYSICO-CHEMICAL ANALYSIS)

It is shown that, on the surface of water, the planar cyclic clusters N_4 and N_5 can form a flat grid of hydrogen bonds with the help of additional H_2O molecules. The interaction of this electrically neutral grid with bulk water leads to the active adsorption of H_3O^+ ions, the emergence of a double electric layer, and the reorientation of all incoherent groups of OH clusters toward the liquid phase. As a result, a negative structural charge arises on the surface of the air/water interface. The surface molecular-cluster interface film formed in this way has a sufficiently high stability and the ability to adsorb H_3O^+ ions and cations of various metals. Evaporation of water must pass through sufficiently large “windows” in the surface cluster grid.

Keywords: *water evaporation mechanisms, air/water interface, molecular model, clusters, rate of evaporation.*