

ЯДЕРНАЯ СПИН-ИЗОМЕРИЯ МОЛЕКУЛ H_2O КАК ВОЗМОЖНАЯ ПРИЧИНА СПОНТАННОГО РАЗБИЕНИЯ ВОДЫ НА ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ КЛАСТЕРЫ

Захаров С.Д.

Федеральное государственное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 53, **E-mail:** stzakhar@sci.lebedev.ru

Дискуссия о микроструктуре воды продолжается почти полтора столетия, но в последнее время она особенно обострилась. Прогресс в технике физического эксперимента привел к неожиданному повороту в исследованиях по этой острейшей проблеме, связанной с развитием многих направлений науки и технологий. С помощью малоуглового рентгеновского рассеяния и других прецизионных рентгеновских методов получены свидетельства структурной неоднородности воды на масштабах 1-2 нм [1,2]. Такое утверждение противоречит общепринятой картине гомогенной, с точностью до тепловых флуктуаций, воды которая сложилась в результате многочисленных работ по ее моделированию методами молекулярной динамики (также иногда называемых компьютерными экспериментами). Поэтому критические комментарии не замедлили последовать [3,4]. Тем не менее, имеются четкие доказательства долговременного влияния на воду некоторых физических факторов, что не необъяснимо в рамках однородной водной структуры. Эти дополнительные аргументы оправдывают серьезное отношение к новой концепции.

В докладе поставлен вопрос о фундаментальной причине спонтанного разбиения воды на два сорта неоднородностей: компоненту с нарушенными водородными связями и флуктуирующие ассоциаты или кластеры с тетраэдрической координацией [1]. Здесь мы обращаем внимание на то, что пространственное распределение электронной плотности в молекуле H_2O не предполагает какой-либо асимметрии в межмолекулярных взаимодействиях, если только игнорировать влияние спиновой изомерии, которое в энергетическом отношении ничтожно мало. Пара и орто спин-изомеры молекулы H_2O имеют различную способность формировать ассоциаты, что обусловлено симметричными свойствами их волновых функций. Пара-молекулы перед встраиванием в кластер могут сбрасывать избыток энергии окружению вплоть до полного прекращения вращения, так как в основном состоянии их вращательное квантовое число $J = 0$. Орто-молекулы имеют нечетные значения J и такой возможностью не обладают, поэтому с большей вероятностью присутствуют в альтернативных местах с нарушенными водородными связями.

Согласно [1,2] характерной особенностью (флуктуирующего) кластера является его тетраэдрическая координация. Будет показано, что этому требованию отвечают ассоциаты двух различных модификаций, одной из которых является решетка обычного (гексагонального) льда, а другой – структуры из универсальных молекулярных блоков или модулей, участвующих в образовании гидратных оболочек биомолекул. Поскольку их свободные энергии оказываются близкими, эти две формы могут сосуществовать. В таком случае возможны взаимные переходы, т.е. осцилляции между этими двумя структурными состояниями через неупорядоченную фазу. Таким автоколебаниям приписывается квазипериодический ритм, слабо зависящий от температуры, тогда как их интенсивность, в отличие обычных представлений статистической физики, растет по мере охлаждения. Предполагается, что структурные автоколебания являются источником флуктуаций различных физических параметров, характеризующих макроскопическое состояние воды, а также активным агентом, синхронизирующим биологические процессы.

THE NUCLEAR SPIN-ISOMERY OF H_2O MOLECULES AS A POSSIBLE CAUSE FOR A SPONTANEOUS COMPARTITION OF LIQUID WATER INTO TIME-SPACE CLUSTERS

S.D. Zakharov

Lebedev Institute of the Russian Academy of Sciences, E-mail: stzakhar@sci.lebedev.ru

Литература

1. Huang C. et al. The inhomogeneous structure of water at ambient conditions//PNAS, 2009, v.106, p.15218.
2. Nilsson A., Pettersson L.G.M. Perspective on the structure of liquid water//Chem.Phys., 2011, v.389, p.1.
3. Soper A.K., Teixeira J., Head-Gordon T. Is ambient water inhomogeneous on the nanometer length scale?// PNAS, 2010, v.107, p.E44.
4. Clark G.N.I., Hura G.L., Teixeira J., Soper A.K., Head-Gordon T. Small-angle scattering and the structure of ambient liquid water// PNAS, 2010, v.107, p.14003.
5. Захаров С.Д. //Биофизика, 2012, в печати.