

УДК: 69

DOI 10.21661/r-552957

Хайдаров Г.Г., Хайдаров А.Г.

МОЛЕКУЛЯРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ РАСПАКОВКИ ВЕЩЕСТВА

Аннотация: в данной статье собраны вместе опубликованные ранее доказательства единой природы физических процессов и явлений в веществе с точки зрения изменения энергии молекулы вещества. Доказана единая физическая природа всех этих физических явлений, как единого многоступенчатого процесса энергетической распаковки молекул вещества, которую логично назвать молекулярно-энергетической концепцией распаковки вещества.

К рассмотренным процессам относятся следующие процессы. Разрыв поверхности, характеризуемый коэффициентом поверхностного натяжения. Процесс плавления вещества, характеризуемый температурой плавления. Процесс кипения, характеризуемый температурой кипения. Процесс испарения (и конденсации), характеризуемый внутренней энергией и энталпиией, а также критической температурой. Выводы теории подтверждены известными эмпирическими зависимостями и данными из справочников физических свойств простых веществ: внутренней энергии, энталпиии, поверхностного натяжения, температур плавления, кипения и критической температуры.

Ключевые слова: физика, вещество, теория, молекула, молекулярная теория, энергия, температура, плавление, кипение, поверхностное, натяжение, распаковка, справочные, данные, связь, взаимосвязь, зависимость, формула.

Khaidarov G.G., Khaidarov A.G.

MOLECULAR ENERGY CONCEPT OF SUBSTANCES UNPACKING

Abstract: this article brings together previously published evidence of the unified nature of physical processes and phenomena in terms of changes in the energy of a substance molecule. The unified physical nature of all these physical phenomena has been proven, as a single multistage process of energetic unpacking of molecules of a

substance, which is logical to call the molecular-energy concept of unpacking a substance.

The considered processes include the following processes. Surface rupture, characterized by the surface tension coefficient. The melting process of a substance characterized by its melting point. A boiling process characterized by the boiling point. Evaporation (and condensation) process characterized by internal energy and enthalpy as well as critical point. The conclusions of the theory are confirmed by well-known empirical dependences and by reference books of the physical properties of simple substances: internal energy, enthalpy, surface tension, melting point, boiling point and critical point.

Keywords: *physics, substance, theory, molecule, molecular theory, energy, temperature, melting, boiling, surface tension, unpacking, reference, data, connection, interrelation, correlation, formula.*

Анализ публикаций

В 1983 году была предложена единая концепция, объединяющая физические понятия испарения, внутренняя энергия, поверхностное натяжение [1]. Предложена виртуальную модель «запакованной» молекулы (по аналогии шара, запакованного внутри коробки). Чтобы «распаковать» такую молекулу, необходимо осуществить разрыв связей с другими молекулами по шести ортогональным направлениям. Из данной модели «распаковка» («отрезание») слоя молекул с одной стороны (по плоскости) приводит к физическому понятию поверхностного натяжения. А «распаковка» («отрезание») молекул со всех шести сторон (перпендикулярно осям X, Y, Z) от других молекулы приводит к физическому понятию внутренней энергии. Такая виртуальная модель позволила теоретически вывести формулу взаимосвязи энталпии, внутренней энергии и поверхностного натяжения. Формула была проверена по данным их справочника [2] для 64 веществ в диапазоне температур от -253 до 200 градусов Цельсия.

В 1985 году аналогичный взгляд на физическую природу поверхностного натяжения, как части внутренней энергии, при решении другой физической

задачи был опубликован академиком В. Вайскопфом (Victor Frederick Weisskopf) в США [3,4]. Однако расчетной формулы в данных статьях приведено не было.

В популярном изложении данная концепция распаковки опубликована в 2010 году в статье [5], в википедии и викиучебнике на русском языке по теме «Поверхностное натяжение». Расширенное научное изложение распаковки молекул вещества со следствиями было опубликовано в 2011 году [6,7]. Следствия гипотезы объясняют некоторые вопросы удельной теплоемкости. А именно, теоретически объяснена эмпирическая взаимосвязь значений теплоемкостей для одно-, двух- и трехатомных газов. Выявлено влияние пространственного расположения атомов на значение теплоемкости молекулы. Дальнейшее развитие концепции «распаковки» было применено для теоретического обоснования зависимости поверхностного натяжения от температуры в 2011 [8] и в 2012 [9] годах. Выведенная теоретическая формула хорошо согласуется с эмпирическими данными [10], а также с известной классической эмпирической зависимостью – правилом Лоранда Этвёша (Loránd Eötvös rule). Применение гипотезы распаковки (в отличие от эмпирических зависимостей) позволило: сформулировать допущения и области применения выведенной теоретической формулы, теоретически получить коэффициент пропорциональности и определить его физический смысл, дать ещё одно определение физического понятия давления как энергии, действующей на объём (момомолекулярного) поверхностного слоя.

Дальнейшее развитие понятия «распаковки» было применено для теоретического обоснования взаимосвязи температур плавления, кипения и критической температуры [11–15]. Для проверки такого использования гипотезы были использованы данные из справочников для 85 веществ, в пределах температур от 13 до 855 градусов Кельвина. Сравнение теоретических формул и экспериментальных данных проводилось по средним значениям. Для такой модели температура плавления составляет $1/3$, а температура кипения от $1/2$ до $2/3$ от критической температуры.

По результатам расчетов из справочных таблиц температур [14, 15] для 73 из 98 рассмотренных нами в статье элементов периодической

системы Д.И. Менделеева получена взаимосвязь температур плавления от температуры кипения. С погрешностью до 40% можно сказать, что гипотеза распаковки вещества описывает экспериментальные данные по взаимосвязи температур для модели интенсивного кипения вещества, в которую должны подставляться экспериментальные данные интенсивного кипения. Для благородных газов и галогенов можно предположить, что кипение происходит не по интенсивной, а по начальной модели кипения, тогда гипотеза распаковки могла бы быть применима и к этим элементам с погрешностью в диапазон от 2 до 20%.

Цель статьи.

В данной работе ставится цель расположить физические процессы в строгой последовательности с точки зрения молекулярно-энергетической теории, дающей единое объяснение известных процессов для молекул веществ. То есть систематизировать полученные ранее теоретические зависимости, подтвержденные опытными данными из справочников.

Изложение основного материала

Рассмотрим последовательность процессов распаковки молекулы вещества с точки зрения изменения ее энергии. Каждому такому изменению энергии можно найти хорошо известный физический процесс, описанный в литературе. Главной задачей в описании этих процессов является не только качественное описание физического процесса, но и количественное его описание по имеющимся в справочниках эмпирическим данным. Для наглядности изложения изобразим ступенчатую схему энергий распаковки молекулы вещества.

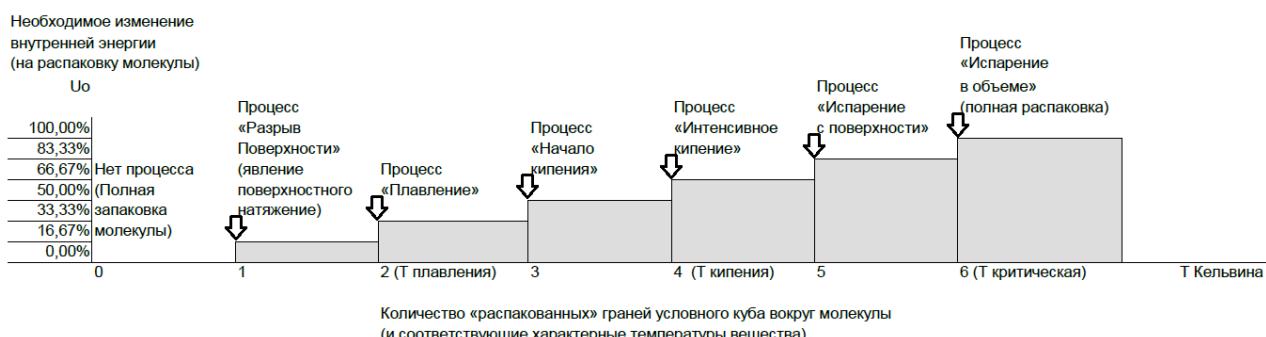


Рис. 1. Схема ступеней распаковки энергий молекулы вещества.

По горизонтальной оси ординат отложим температуру, как характеристику вещества. В предыдущих работах нами была однократно доказана связь ее с внутренней энергией для описываемых процессов. Во вертикальной оси отложим ступени распаковки энергии молекулы вещества. Напомним, что в трехмерной ортогональной системе координат и в работах [1,3,4], таких направлений распаковки шесть. Поэтому у нас получится 6 ступеней изменения внутренней энергии. Для каждой молекулы это изменение приходит ступенчато (дискретно), а не непрерывно. То есть в своем роде энергетический скачок. Теперь осталось только разместить на этих ступенях известные и ранее описанные в литературе физические процессы. Почти все эти процессы уже были рассмотрены по отдельности в наших ранее опубликованных работах. И, что самое главное, доказана их единная физическая природа с точки зрения распаковки внутренней энергии молекул, выведены для них расчетные формулы, подтвержденные данными физических величин из справочников.

Для удобства дальнейших расчетов будем использовать формулы с удельной энергией на единицу массы вещества.

Посчитаем полную энергию распаковки молекулы или ее соответствие в физике – изменение внутренней энергии. Из работ [1; 5; 6] возьмем формулу для расчета изменения удельной внутренней энергии (U), необходимой для распаковки вещества в одном из 6 направлений.

$$\sigma = U \cdot (M^{1/3} \cdot \rho^{2/3}) / (6 \cdot N^{1/3}), \quad (1)$$

где σ – поверхностное натяжение, Дж/ м² ; U – изменение внутренней энергии, Дж/кг; M – молекулярная масса, кг/моль; ρ – плотность, кг/м³ ; N – число Авогадро, моль⁻¹.

А также формулу для связи ее с критической температурой из нашего теоретического вывода правила Лоранда Этвёша [8,9]. Рассмотрим

$$\Delta \sigma_o = (\rho^{2/3} \cdot R_u \cdot \Delta T_{kp}) / (M^{2/3} \cdot N^{1/3}), \quad (2)$$

где $\Delta \sigma_o$ – разность значений поверхностных натяжений при нуле градусов Кельвина и критической температуре, Дж/ м² ; R_u – универсальная газовая

постоянная, Дж/(К° · моль); $\cdot \Delta T = T_{kp} - T_o$ – разность температур между критической и нулевой, ·К° ; М – молекулярная масса, кг/Кмоль;

Тогда общее максимальное изменение внутренней энергии по всем 6 направлениям достигаемое при полной «распаковке» молекулы при увеличении температуры от нуля градусов Кельвина до критической температуры молекулы вещества (в газообразного состояния) будет равно:

$$U_o = 6 \cdot (R_u \cdot T_{kp}) / M, \quad (3)$$

где U_o – максимальное изменение внутренней энергии, Дж/кг; R_u – универсальная газовая постоянная, Дж/(К° · моль); T_{kp} – критическая температура, ·К° ; М – молекулярная масса, кг/моль.

С учетом отличия энталпии от внутренней энергии

$$I = U + p \cdot \Delta V / m, \quad (4)$$

где I – энталпия, Дж/ кг ; p – давление, Н/ м² ; ΔV – изменение объема, м³ ; m – масса, кг.

Далее с учетом уравнения Менделеева-Клайперона получим уравнение изменения энталпии.

$$\Delta I = \Delta U + (R_u \cdot T) / M (1 - \rho_{par} / \rho), \quad (5)$$

Для перехода из полностью запакованного состояния молекулы в распакованное с учетом выражения внутренней энергии вещества из уравнения (3) получим значение для максимального изменения внутренней энергии от нуля градусов Кельвина до критической температуры вещества.

$$\Delta I = 6 \cdot (R_u \cdot T_{kp}) / M + (R_u \cdot T) / M (1 - \rho_{par} / \rho), \quad (6)$$

В подтверждение правильности данной теоретической молекулярно- энергетической концепции сделаем теоретический вывод эмпирической зависимости, известной как правило Фредерика Томаса Траутона (Трутон) (Frederick Thomas Trouton's rule). Данное эмпирическое правило Трутон определяет взаимосвязь молярной энталпии с температурой. В этом уравнениям ΔS – молярная энтропия испарения определяется как отношение молярной энталпии испарения к нормальной температуре кипения. Приведем эту приближенную эмпирическую формулу.

$$\Delta S = 10,5 \cdot R_u, \quad (4)$$

где $\Delta S = \Delta I / T_{\text{кипения}}$ – энтропия испарения определяется как отношение между молярной энталпийей испарения к нормальной температуре кипения.

Для вывода связи нашей формулы с правилом Трутоне оценим максимально значение, получаемое по нашей формуле (6). В формулу (6) подставим уравнение связи температур интенсивного кипения и критической из наших работ [13, 14, 15].

$$T_{\text{кипения}} = \text{от } 1/2 \cdot T_{\text{кр}} \text{ до } 2/3 \cdot T_{\text{кр}} \quad (6)$$

и получения молярного значения внутренней энергии ($U_{\text{mol}} = U_o \cdot M$) получим аналог формулы Трутоне для максимального значения изменения внутренней энергии вещества при распаковки.

$$U_{\text{mol}} / T_{\text{кипения}} = \text{от } 10 \cdot R_u \text{ до } 13 \cdot R_u, \quad (7)$$

где U_{mol} – молярное значение изменения внутренней энергии, Дж/моль.

Таким образом из сравнения нашей концепции с эмпирическим правилом Трутоне можно сделать два вывода:

– по нашей теоретической формуле, как и по правилу Трутоне мольная энтропия мало зависит от физических величин и близка к константе.

– по нашей концепции объяснено и получено максимальное значение коэффициента для правила Трутоне и оно близко к эмпирическим данным из справочников. Для этого авторами были обработаны данные справочников для 464 органических веществ и получено среднее значение коэффициента правила Трутоне равное 10,86. То есть число укладывается в теоретический диапазон от 10 до 13.

Для еще одного подтверждения нашей концепции была взята формула для связи теплоты плавления металлов с температурой плавления вещества, взятая из работы Гаврилина И.В. (16)

В данной работе предлагается формула для определения температуры плавления металлов

$$T_{\text{плавления}} = \Delta H / (1,5 \cdot N \cdot k), \quad (8)$$

где ΔH – скрытая теплота плавления, Дж/ моль;

k – константа Больцмана.

Преобразуем выведенную нами формулу (3) к виду, аналогичному энталпии (4) в эмпирическом правиле Трутонса.

После преобразования этой формулы к виду аналога правила Трутонса, но для плавления, получим

$$\Delta H / T_{\text{плавления}} = 1,5 \cdot R_u, \quad (9)$$

Из нашей концепции с учетом пренебрежимо малого испарения молекул металла перед процессом плавления определим максимально возможный коэффициент из нашей концепции плавления. Из наших расчетов максимальное значение этого коэффициента равно 2, а общее изменение этого коэффициента из нашей модели возможно от 1 до 2 (рис. 1).

В работе [16] предлагается этот коэффициент (8), (9) равный 1,5.

Такое расхождение можно объяснить тем, что металл начинает плавиться не сразу во всем объеме, а частями по поверхности. По аналогии наших моделей распаковки для начала кипения и для модели интенсивного кипения. Из концепции распаковки молекул мы предполагали, что процесс плавления начнется с текучестью вещества, то есть при 2/6 распаковки молекулы. Но расчеты по удельной теплоте плавления вещества и температуре начинается при меньших суммарных энергия распаковки вещества. Это можно объяснить началом плавления поверхностного слоя вещества, там, где энергия распаковки равна 1/6 энергии распаковки вещества. В этом случае начало плавления вещества будет от 1/6 до 2/6 энергии распаковки молекулы вещества. Поэтому изменение этого коэффициента из нашей модели возможно от 1 до 2.

Выводы

1. На основании изучения и сопоставления физических процессов [1–16] происходящих в веществе с изменением температуры и внутренней энергии предложена молекулярно-энергетическая модель распаковки вещества. Доказана единая физическая природа описанных в ранних работах физических процессов, как единого многоступенчатого процесса энергетической распаковки молекул вещества. Данную концепцию логично назвать молекулярно-

энергетической концепцией распаковки вещества, так как главную роль в распаковке вещества играет внутренняя энергия.

2. Данная концепция доведена до расчетных формул, подтвержденных известными эмпирическими зависимостями и данными из справочников по физическим свойствам веществ. А именно: доказательством физической природы поверхностного натяжения жидкостей [1,5,6,7], теоретическим выводом эмпирического правила Лоранда Этвёша [8,9], выводом в данной работе эмпирического правила Трутона (Траутона) -постоянства энталпии при температуре плавления. А также объяснения связи скрытой теплоты плавления с температурой плавления.

Список литературы

1. Хайдаров Г.Г. О связи поверхностного натяжения жидкости с теплотой парообразования / Г.Г. Хайдаров // Журн. физ. химии. – 1983. – Т. 57. – №10. – С. 2528–2530.
2. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей / Н.Б. Варгафтик. – М.: Наука, 1972. – 720 с.
3. Weisskopf V.F. Search for Simplicity / V.F. Weisskopf // American J. of Physics. – 1985. – Vol. 53. – N 1. – P. 19–20.
4. Weisskopf V.F. Search for Simplicity: The size of molecules revisited / V.F. Weisskopf // American J. of Physics. – 1985. – Vol. 53. – N 7. – P. 618–619.
5. Хайдаров Г.Г. Физическая природа поверхностного натяжения жидкости / Г.Г. Хайдаров // Диалоги о науке. – 2010. – №1. – С. 111–113.
6. Хайдаров Г.Г. Физическая природа поверхностного натяжения жидкости / Г.Г. Хайдаров, А.Г. Хайдаров, А.Ч. Машек // Вестник Санкт-Петербургского университета. – Серия 4 (Физика, химия). – 2011. – №1. – С. 3–8.
7. Khaidarov G.G. The physical nature of liquid surface tension / G.G. Khaidarov, A.G. Khaidarov // Intellectual Archive. – 2014. – Vol. 3. – №1. – P. 26–29.
8. Хайдаров Г.Г. Вывод теоретической зависимости поверхностного натяжения от температуры из теории «распаковки молекул» / Г.Г. Хайдаров // Диалоги о науке. – 2011. – №2. – С. 33–38.

9. Хайдаров Г.Г. Влияние температуры на поверхностное натяжение / Г.Г. Хайдаров, А.Г. Хайдаров, А.Ч. Машек, Е.Е. Майоров // Вестник Санкт-Петербургского университета. – Серия 4 (Физика, химия). – 2012. – №1. – С. 24–28.
10. Lielmezs J. New Surface Tension Correlation for Liquids / Lielmezs J., T.A. Herrick // The Chem. Eng. J. – 1986. – Vol. 32. – P. – 165–169.
11. Хайдаров Г.Г. Взаимосвязь температур плавления, кипения и критической температуры / Г.Г. Хайдаров, А.Г. Хайдаров // Интерактивная наука. – 2016. – №3. – С. 113–116.
12. Khaidarov G.G. The Relationship Between Melting Point, Boiling Point and Critical Point / G.G. Khaidarov // Intellectual Archive. – 2016. – Vol. 5. – No. 2. pp. 15–19.
13. Хайдаров Г.Г. Физическая модель взаимосвязи температур плавления, кипения и критической температуры / Г.Г. Хайдаров // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). – 2016. – №35(61). – С. 10–13.
14. Хайдаров Г.Г. Взаимосвязь температур плавления, кипения и критической температуры / Г.Г. Хайдаров, А.Г. Хайдаров // Wschodnioeuropejskie Czasopismo Naukowe (East European Scientific Journal). – 2016. – №8. – С. 162–164.
15. Хайдаров Г.Г. Взаимосвязь температур плавления и кипения вещества из гипотезы распаковки вещества / Г.Г. Хайдаров, А.Г. Хайдаров // Интерактивная наука. 2018. №8(30). – С. 27–31.
16. Гаврилин И.В. Расчёт температуры плавления металлов // Плавление и кристаллизация металлов и сплавов. – Владимир: Изд. ВлГУ, 2000. – С. 72.

References

1. Khaidarov, G. G. (1983). O sviazi poverkhnostnogo natiazheniiia zhidkosti s teplotoi paroobrazovaniia. *Zhurn. fiz. khimii*, T. 57, 10, 2528-2530.
2. Vargaftik, N. B. (1972). Spravochnik po teplofizicheskim svoistvam gazov i zhidkostei., 720. M.: Nauka.

-
3. Weisskopf, V. F. (1985). Search for Simplicity. *American J. of Physics*, Vol. 53, 1.
 4. Weisskopf, V. F. (1985). Search for Simplicity: The size of molecules revisited. *American J. of Physics*, Vol. 53, 7.
 5. Khaidarov, G. G. (2010). Fizicheskaya priroda poverkhnostnogo natiazheniya zhidkosti. *Dialogi o nauke*, 1, 111-113.
 6. Khaidarov, G. G., Khaidarov, A. G., & Mashek, A. Ch. (2011). Fizicheskaya priroda poverkhnostnogo natiazheniya zhidkosti. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta, Seriya 4 (Fizika, khimiia)*, 1, 3-8.
 7. Khaidarov, G. G., & Khaidarov, A. G. (2014). The physical nature of liquid surface tension. *Intellectual Archive*, Vol. 3, 1.
 8. Khaidarov, G. G. (2011). Vyvod teoretycheskoi zavisimosti poverkhnostnogo natiazheniya ot temperatury iz teorii "raspakovki molekul". *Dialogi o nauke*, 2, 33-38.
 9. Khaidarov, G. G., Khaidarov, A. G., Mashek, A. Ch., & Maiorov, E. E. (2012). Vliyanie temperatury na poverkhnostnoe natiazheniya. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta, Seriya 4 (Fizika, khimiia)*, 1, 24-28.
 10. Lielmezs, J., & Herrick, T. A. (1986). New Surface Tension Correlation for Liquids. *The Chem. Eng. J*, Vol. 32, .
 11. Khaidarov, G. G., & Khaidarov, A. G. (2016). Vzaimosviaz' temperatur plavleniya, kipenii i kriticheskoi temperatury. *Interaktivnaya nauka*, 3, 113-116.
 12. Khaidarov, G. G. (2016). The Relationship Between Melting Point, Boiling Point and Critical Point. *Intellectual Archive*, Vol. 5, 215.
 13. Khaidarov, G. G. (2016). Fizicheskaya model' vzaimosviazi temperatur plavleniya, kipenii i kriticheskoi temperatury. *Izvestiya Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo instituta (tekhnicheskogo universiteta)*, 35(61), 10-13.

14. Khaidarov, G. G., & Khaidarov, A. G. (2016). Vzaimosviaz' temperatur plavleniia, kipeniiia i kriticheskoi temperatury. *Wschodnioeuropejskie Czasopismo Naukowe (East European Scientific Journal)*, 8, 162-164.
 15. Khaidarov, G. G., & Khaidarov, A. G. Vzaimosviaz' temperatur plavleniia i kipeniiia veshchestva iz gipotezy raspakovki veshchestva. *Interaktivnaia nauka. 2018. 8(30), S. 27.*
 16. Gavrilin, I. V. (2000). Raschiot temperatury plavleniia metallov. *Plavlenie i kristallizatsiia metallov i splavov*, 72. Vladimir: Izd. VlGU.
-

Хайдаров Геннадий Гасимович – канд. техн. наук, доцент ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», Санкт-Петербург, Россия.

Khaidarov Gennadii Gasimovich – candidate of engineering sciences, associate professor of FSEI of HE «St. Petersburg State Technological Institute (technical university)”, St. Petersburg, Russia.

Хайдаров Андрей Геннадьевич – канд. техн. наук, доцент ФГБОУ ВО Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», Санкт-Петербург, Россия.

Khaidarov Andrey Gennadyevich – candidate of engineering sciences, associate professor of FSEI of HE «St. Petersburg State Technological Institute (technical university)”, St. Petersburg, Russia.
