

РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУРНОЇ ЗАЛЕЖНОСТІ ЕНЕРГІЇ АКТИВАЦІЇ САМОДИФУЗІЇ У ВОДІ

В роботі запропонована нова методика розрахунку енергії активації дифузії та проведено розрахунок температурної залежності енергії активації дифузії для молекул у чистій воді за даними про її в'язкість у всьому діапазоні існування її рідкої фази - від точки плавлення до критичної. Величина енергії активації характеризує діючі усередненні сили зв'язку між молекулами і визначає їх рухливість, що має велике значення для властивостей води. Оскільки сама дифузія визначається з великою похибкою, запропоновано провести розрахунок енергії активації використовуючи більш точні дані про її в'язкість. Розрахунок проведено за модифікованою формулою, де застосована не динамічна, а кінематична в'язкість, для якої зберігається число взаємодіючих молекул у процесі нагріву, а також використовуючи формулу Стокса-Ейнштейна зв'язку в'язкості та дифузії. Розрахована температурна залежність енергії активації дифузії в чистій воді (самодифузії). Показано, що вона містить два вкладу - основний ступеневий, що зменшується до нуля у критичній точці і пропорційний кореню другого ступеня, а також поблизу точки плавлення експонентний. Експонентний внесок в енергію активації обумовлений наявністю додаткових взаємодій молекул у кластерах води, що швидко руйнуються з нагріванням. Величина енергії активації дифузії більша за енергію активації в'язкості і більш повільно убуває з ростом температури. Даний ефект пов'язаний з тим, що під час дифузії взаємодії молекул є об'ємними, тривимірними, тоді як під час течії постійно рвуться зв'язки між шарами рідини та відповідними молекулами і взаємодії молекул стають квазідвовимірними. Це веде до більшої величини енергії активації для дифузії і більш повільного ступеневого її зменшення з ростом температури, тоді як енергія активації в'язкості менша за величиною і убуває лінійно до критичної точки води, аналогічно силам поверхневого натягу.

Ключові слова: молекула води, рухливість, дифузія, в'язкість, течія рідини, взаємодія молекул, сили міжмолекулярних зв'язків, енергія активації.

Постановка проблеми. Вода та її властивості [1, 2] мають найважливіше значення в житті людей. Рухливість молекул води в ній визначається як самодифузія (далі - дифузія) її молекул. Мала величина коефіцієнта дифузії говорить про стабільність її структури, малість числа молекул, що розірвали зв'язки із сусідніми молекулами і переміщуються у нові позиції. Однак цей параметр експериментально визначається зі значною похибкою. Тому було запропоновано зіставити його із в'язкістю, яка визначається з високою точністю. Також це дозволить визначити з хорошою точністю величину середньої енергії зв'язків між молекулами води під час дифузії, як енергію активації їх руху.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Молекули води в рідкій фазі знаходяться в конденсованому стані і здійснюють цілий спектр різних коливань поблизу своїх тимчасових положень рівноваги. Вплив коливань атомів і молекул на їх рухливість та фазовий стан речовин розглядається в теорії ефекту Яна-Теллера [3]. У ній з хаосу всіх коливань виділяються ті коливальні моди, які відповідають за переходи в новий фазовий стан. В [4] показано, що найбільш важливими з них для води під час плавлення льоду і переході його в рідкий стан є обертальні (лібраційні) моди коливань. Вони призводять до переходу льоду до рідкої фази води та появи колективізованих незатухаючих обертальних коливань молекул, що водночас веде до появи динамічно вигнутих їх міжмолекулярних водневих зв'язків. Наявність

Економіка та управління підприємствами

великої кількості мод коливань молекул у воді веде до великої кінетичної та обертальної енергії молекул, до їх високої рухливості.

Для чистої води її в'язкість відома з високою точністю з міжнародних таблиць даних [5]. Це дозволяє визначити з хорошою точністю величину середньої енергії зв'язків між молекулами води як її енергію активації [4]. Під час дифузії немає течії рідини, а тому можуть змінитися умови розриву зв'язків та величини енергій цих зв'язків.

Розчинені у воді речовини, в залежності від розмірів їх атомів і іонів, спрямованості і числа їх зв'язків, можуть зміцнювати або послаблювати структуру води, відповідно, при цьому посилюються або послаблюються середні енергії зв'язків між молекулами. Ці енергії пов'язують з середньою величиною енергії активації E_a у рідині (енергії розриву зв'язків між молекулами для переміщення її в сусідню вільну позицію). Величину енергії активації E_a в'язкої течії (в'язкості) для даної рідини можна визначити з температурної залежності динамічної в'язкості рідини η за формулою Ареніуса - Ейрінга - Френкеля [6, 7]:

$$\eta = A \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1)$$

де R – універсальна (мольна) газова стала, T – абсолютна температура, [К]. Хоча коефіцієнт A має різний вигляд у різних моделях, можна показати, що він в (1) пропорційний густині рідини ρ [4, 7], і в формулі (1) можна виділити кінематичну в'язкість $\nu = \eta/\rho$. Це узгоджується з фізичним змістом кінематичної в'язкості: з формули Пуазейля для витікання рідини через капіляр слід, що витікання одиниці її об'єму обернено пропорційно динамічній в'язкості η , а одиниці маси - кінематичної ν . Тобто, кінематична в'язкість ν описує витікання постійного числа частинок даного розчину ($N = N_a/\mu$, де N_a - число Авогадро, μ - молекулярна маса), що узгоджується за змістом з енергією активації E_a (мольної). Тому необхідно модифікувати формулу (1), записавши її через кінематичну в'язкість ν [4]:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} = A' \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1,a)$$

Звідси розрахована середня ефективна енергія зв'язку (активації) за формулою дискретного диференціювання для двох близьких температур T_i (за умови $A' = A/\rho \approx const$):

$$E_a = R \frac{d \ln \nu}{d\left(\frac{1}{T}\right)} \approx R \frac{\ln \nu_2 - \ln \nu_1}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}} \quad (2)$$

Результати розрахунку величини енергії активації E_a [4] по найбільш точним стандартним даними для в'язкості води на лінії насичення від точки плавлення до критичної [5] представлені на рис. 1, крива 1. На даному графіку простежується досить лінійне зменшення енергії E_a в області 70 ... 250 °С до критичної температури, а поблизу точки плавлення наявність суттєвої експоненційної добавки (до 30 %). Під час апроксимації енергії активації E_a припущено, що вона лінійно прагне до нуля в критичній точці води $t_{кр} = 374$ °С, аналогічно поверхневому натягу в рідинах, що досліджувався Д.І. Менделєєвим. Для інтервалу температур 0 ... 200 °С отримана апроксимуюча залежність [4]:

$$E_a(\nu) = 15,36 (1 - t/374) + 6,16 \exp(-t/25,4) \text{ [кДж/моль]}, \quad (3)$$

де t - температура води [°С].

Економіка та управління підприємствами

Середньоквадратичне відхилення кривої (3) від розрахунків за даними [5] на інтервалі температур до 200 °С становить менше 0,6 % від середнього значення енергії активації, що вказує на надійність отриманого результату. Розрахунки показують, що значний вплив на величину енергії активації в багатьох рідинах надає їх стисливість. У води стисливість найменша і помітне додаткове зростання енергії активації спостерігається лише вище 200 °С. Урахування стисливості води [4] (рис. 1, крива 3) веде до більш близької залежності розрахункових точок із апроксимацією (3) аж до 270 °С.

Розрахунок же енергії активації $E_a(\eta)$ з динамічної в'язкості η (рис. 1, крива 4) веде до гіперболічного зростання її величини вище 250 °С. Це пов'язано з тим, що число взаємодіючих молекул в заданому об'ємі під час течії та пропорційні їм густина і динамічна в'язкість рідини, швидко зменшуються під час наближення до критичної температури. Це призводить до помилкового висновку про зростання енергії активації. При цьому кінематична в'язкість монотонно зменшується з нагріванням до постійної величини, а її енергія активації $E_a(v)$ - до малих значень (рис. 1, крива 1), що відповідає фізичним поглядам на неї поблизу критичної температури. Зростання стисливості води вище 200 °С не дозволяє визначити її енергію активації з достатньою точністю.

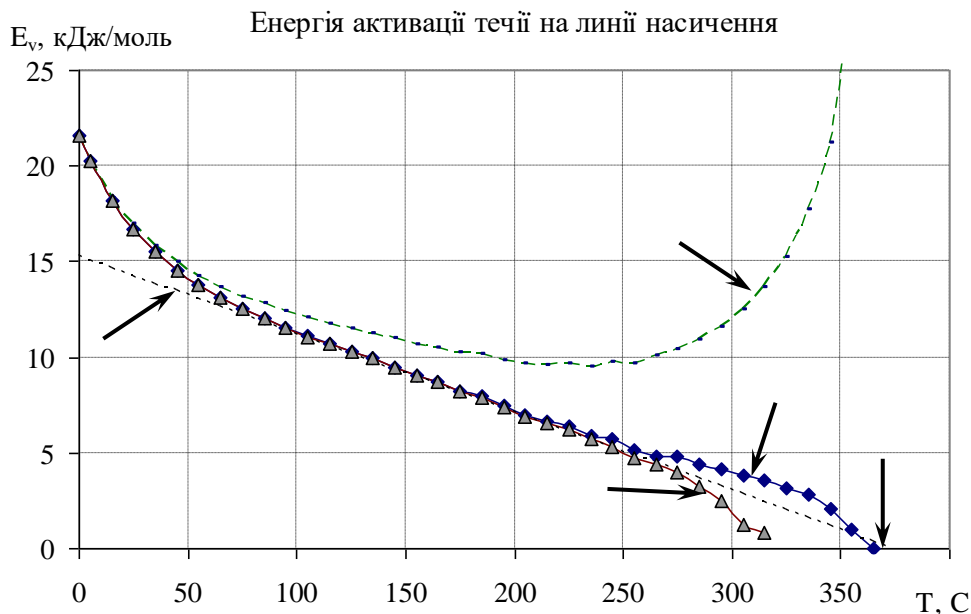


Рисунок 1 – Температурна залежність енергії активації в'язкості води на лінії насичення [4]:

крива 1 – енергія активації $E_a(v)$, 2 – лінія апроксимації лінійним членом,

3 – енергія $E_a(v_p)$ за умови урахування впливу тиску,

4 – енергія $E_a(\eta)$, що розрахована з динамічної в'язкості η

Для оцінки величини коефіцієнта дифузії в рідинах широко використовується її зв'язок з в'язкістю за формулою Стокса-Ейнштейна [1]:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta R} = \frac{k}{6\pi R} \cdot \left(\frac{T}{\eta}\right) \quad (4)$$

де T - абсолютна температура, k - постійна Больцмана, R - середній радіус (розмір) молекули. Іноді для кращого наближення результатів розрахунку до експерименту коефіцієнт

Економіка та управління підприємствами

6 у формулі (4) замінюють коефіцієнтом 4, що свідчить про наявність та інше співвідношення різних механізмів розриву зв'язків в цих рідинах. У [1] вказується, що величина добутку $D\eta/T$ для води залишається майже незмінною в деякому інтервалі температур, що узгоджується зі співвідношенням (4).

Для обертальної дифузії в рідинах формула дещо зміниться

$$D_{rot} = \frac{kT}{8\pi\eta R^3} \quad (5)$$

Якщо додатковий множник R^2 в (5) пов'язати з моментом інерції молекули mR^2 , то множник $1/8$ може показувати, що обертальна дифузія може становити від $1/2$ до $3/4$ від загальної дифузії (4), ця частка залежить також від будови і симетрії молекул. Необхідно відзначити, що обертальні коливання в воді надзвичайно важливі і вносять основний внесок в її теплоємність [3, 4, 9]. Найбільші взаємодії сусідніх молекул можна очікувати під час синхронізації їх обертальних коливань і по частоті і по фазі. В цьому випадку час взаємодії буде найбільшим, що при наявності потрібної енергії може призвести до дифузії молекул.

Мета дослідження. Метою дослідження є розрахунок температурної залежності енергії активації дифузії в чистій воді за даними про її в'язкість та порівняння її з енергією активації для в'язкості, встановлення її зв'язку з умовами для процесів в'язкої течії та дифузії.

Основний матеріал дослідження. Під час розрахунку енергії активації дифузії E_D згідно співвідношення (4) була використана температурна залежність дифузії, що пропорційна відношенню (ν/T) для води на лінії насичення за точними даними [5]. Тут також з умовою збереження числа молекул з нагрівом застосована кінематична в'язкість ν . За модифікованою формулою (1,а) із залежності (ν/T) , підставленої в (2) замість в'язкості ν , була розрахована ефективна середня величина енергії активації дифузії E_D (рис. 2, крива 1).

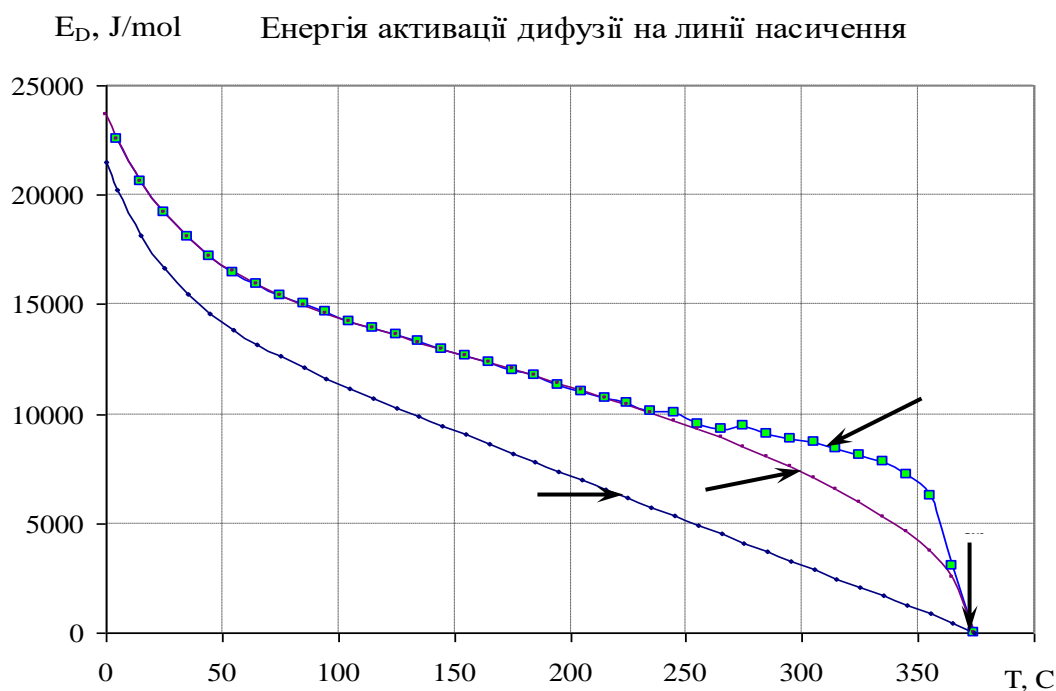


Рисунок 2 – Температурна залежність енергії активації дифузії води на лінії насичення: крива 1 – енергія активації E_D (ν/T), 2 – лінія апроксимації дифузії ступеневим членом (6), 3 – енергія активації в'язкості за апроксимації (3)

Економіка та управління підприємствами

Бачимо, що так само, як і для енергії активації в'язкості, є експонентний внесок, а загальна температурна залежність стала нелінійною і близька до кореня квадратного. Апроксимація даних розрахунку для інтервалу температур 0 ... 200 °C дала співвідношення:

$$E_D (v/T, t) = 16,50 (1 - t/374)^{0,5} + 7,20 \exp(-t/32,0) \text{ [кДж/моль]} \quad (6)$$

Бачимо досить добре узгодження апроксимації (6) і розрахункових точок аж до 240 °C (рис. 2, криві 1 і 2). Як і для в'язкості (3) перший член апроксимації (6) є основним і складає 71 % енергії активації при 0 °C і 100 % – вище 100 °C. Величина похибки апроксимації між (6) і даними розрахунку за даними [5] в даному інтервалі температур дає 0,28 % від величини енергії активації E_D . Відхилення розрахункових точок від співвідношення (6) починають зростати лише вище 100 °C, але не перевищують ± 1 %. Відзначимо, що розрахунки за експериментальними даними мають гарну згоду для обох апроксимацій енергії активації в інтервалах температур до 200 °C. Це може свідчити про сталість коефіцієнтів A' в формулах виду (1, а) для цих величин у даному інтервалі температур, доцільність використання формули Стокса-Ейнштейна для розрахунку температурної залежності дифузії із залежності (v/T) , а також про помітний вплив тиску насичення і температури на них вище 200 °C.

У таблиці 1 наведені величини відносних змін параметрів апроксимації енергії активації дифузії E_D (6) порівняно з енергією активації в'язкої течії (3) для параметрів їх апроксимації в загальному вигляді:

$$E_a = A(1 - t/t_{кр})^n + B \exp(-t/t_{ЯТ}). \quad (7)$$

Таблиця 1 – Зміна параметрів апроксимації (7) енергії активації дифузії (6) порівняно з в'язкою течією (3)

| Параметр | A | $t_{кр}$ | n | B | $t_{ЯТ}$ | $A+B$ |
|----------|-------|----------|---------|--------|----------|--------|
| Зміна | 7,2 % | 0,0 % | -50,0 % | 16,8 % | 26,3 % | 10,0 % |

Основна відмінність величин вкладів в (3) і (6) полягає в ступені n при першому члені, що призводить до більш повільного зменшення енергії активації дифузії з температурою, ніж для в'язкості (рис. 2, криві 2 і 3). Згідно (6) величини вкладів в енергію активації вирости порівняно з (3) - при 0 °C в 1,1 рази ($A + B$, табл. 1), а при 260 °C - у 2 рази.

Для основного температурного члена енергії активації дифузії маємо ступінь $n = 0,5$. Тому напрошується його порівняння з теплою пароутворення, для якої апроксимація температурної залежності дає величину ступеня $n \approx 1/3$, а для внутрішньої теплоти пароутворення - $n = 0,4$. Дана відмінність ступеня для енергії зв'язку між молекулами під час дифузії може бути пов'язано з тим, що в неї вносять вклади як трансляційні зміщення, так і обертальні. В силу зігнутості ланцюгів водневих зв'язків (кути вигину зв'язків близькі до тетраедричного $\theta \approx 109,5^\circ$) під час передачі збуджень у воді завжди буде присутній внесок від обертальних коливань, що сприяють зміні напрямків коливань і зміщень. Тому під час переміщення молекули у сусідню позицію вона повертається відносно початкового положення і сусідів на кут близький до куту θ , що вимагає додаткової обертальної енергії.

У [4] вказувалося, що експонентний ("ентропійний") член в енергії активації згідно до теорії ефекту Яна-Телера [3] обумовлений руйнуванням залишків кристалічної структури льоду, у вигляді водних кластерів [1, 8]. Збільшення температури $t_{ЯТ}$ в експоненційному члені для дифузії (з 25,4 К до 32,0 К) може говорити про посилення і більшу стабільність зв'язків молекул у разі відсутності зовнішніх сил. Це пов'язано з посиленням зв'язків між шарами

Економіка та управління підприємствами

рідини, які у випадку її течії постійно руйнуються. Також відзначимо, що дифузія молекул відбувається спонтанно, а течія – під дією зовнішніх сил, які знижують величини потенційних бар'єрів для пересування молекул у рідини [1, 7]. При цьому течія рідини йде не тільки примусово, а й по найслабшим зв'язкам і шарам у рідині, що виникають внаслідок як течії, так і теплового руху її молекул.

Похибка апроксимації енергії активації дифузії приблизно вдвічі менше, ніж для в'язкості. При цьому найменша похибка апроксимації для в'язкості (3) буде спостерігатися при збільшенні критичної температури $t_{кр}$ на 10 ... 15 °С, а для дифузії (6) - при зменшенні $t_{кр}$ на 10 °С. Це можна пояснити тим, що з ростом тиску насичення з температурою молекули зближуються і сили зв'язків в рідини і відповідна енергія активації в'язкості зростають. Розриви зв'язків між шарами ведуть до появи тимчасових локальних зарядів на молекулах води, що не компенсуються. Це також веде до посилення їх зв'язків усередині шарів і, відповідно, зростає температура руйнування цих зв'язків. Тиск водночас веде до росту кутів вигинів водневих зв'язків, що ведуть до їх додаткового послаблення. Це можна трактувати як більш швидке зменшення сил зв'язків і температури їх руйнування для процесу дифузії з ростом тиску насичення і кутів вигинів водневих зв'язків під час нагрівання.

Зіставляючи енергії активації дифузії і в'язкості, бачимо, що вона більше за величиною і повільніше змінюється для дифузії. Під час дифузії всі зв'язки діють в об'ємі, є тривимірними, вони однакові у всіх напрямках і додатково не послаблюються. Зменшення енергії активації під час течії пов'язано з наявністю зовнішніх сил [6, 7], які ведуть до розривів зв'язків між шарами. Течія шарів рідини йде уздовж площин течії і зв'язки, що перпендикулярні до них, легше рвуться (локальний модуль зсуву завжди менший за модуль пружності, тим більше, що усереднений модуль зсуву в рідинах нульовий). Усереднений нульовий модуль зсуву в рідинах може бути унаслідок передачі пружної енергії між молекулами під час течії, що також може вести до зменшення енергії активації в'язкості.

Лінійне зменшення енергії активації в'язкості до критичної температури мабуть говорить про те, що під час течії шарів рідини в ній діють сили, що за структурою ближче до сил поверхневого натягу. Для поверхневого натягу відсутні зв'язки з одного боку поверхні рідини, а для течії - спостерігаються постійні розриви зв'язків з двох сторін щодо площини течії. Для зовнішньої поверхні ми маємо сусідів молекули у п'яти напрямках координат із шості, тобто розмірності 2,5D для цих сил. Тому можна вважати, що під час течії також діють сили розмірності 2,5D, тоді як під час дифузії – об'ємні, розмірності 3D. Якщо вважати, що сили зв'язків з напрямками не змінюються, те під час дифузії (3D) відносно течії (2,5D) енергії зв'язків повинні зрости пропорційно 0,5D, тобто на 1/5, або на 20 %. Однак зростання при 0 °С складає 10 % (A + B, табл. 1), особливо менше для параметру A (табл. 1). Таке зменшення енергії активації в'язкої течії щодо дифузії внаслідок постійних розривів зв'язків (на 10 %, а не 20 %) можна пов'язати з посиленням сил міжмолекулярних зв'язків усередині шарів під час течії.

ВИСНОВКИ

Запропонована нова методика розрахунку енергії активації дифузії. Розрахована температурна залежність величини енергії активації дифузії молекул в воді на лінії насичення від точки плавлення до критичної, використовуючи точні дані про її в'язкість та кореляцію цих параметрів. Визначені параметри апроксимації для енергії активації дифузії та вони зіставлені з енергією активації в'язкої течії.

Головна відмінність дифузії від течії полягає в тому, що під час дифузії взаємодії молекул є об'ємними – тривимірними (3D), тоді як під час течії постійно рвуться зв'язки між шарами рідини і взаємодії стають квазидвовимірними (2,5D) і тому більш слабкими. Внаслідок

Економіка та управління підприємствами

тривимірності сили міжмолекулярних взаємодій під час дифузії більші за величиною і основний внесок в них зменшується до критичної точки води з ростом температури більш повільніше - як корінь другого ступеня, тоді як у разі течії – лінійно.

Список використаних джерел:

1. *Эйзенберг, Д.* Структура и свойства воды : пер. с англ. / *Д. Эйзенберг, В. Кауцман.* – Л. : Гидрометеиздат, 1975. – 280 с.
2. *Маленков, Г. Г.* Структура и динамика жидкой воды / *Г. Г. Маленков* // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47, № 7. – С. 5–35.
3. *Берсукер, И. Б.* Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии : пер. с англ. / *И. Б. Берсукер.* – М. : Наука, 1987. – 344 с.
4. *Малафаев, Н. Т.* О взаимодействиях и динамике молекул в чистой воде / *Н. Т. Малафаев* // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – 2011. – Т. 52, № 4/8. – С. 48–58.
5. *Ривкин, С. А.* Теплофизические свойства воды и водяного пара / *С. А. Ривкин, А. А. Александров* – 2-е изд. – М. : Энергия, 1980. – 422 с.
6. *Френкель, Я. И.* Кинетическая теория жидкостей / *Я. И. Френкель.* – М. : Изд-во АН СССР, 1959. – 253 с.
7. *Глестон, С.* Теория абсолютных скоростей реакций / *С. Глестон, К. Лейдлер, Г. Эйринг.* – М. : Изд-во иностр. лит., 1948. – 584 с.
8. *Малафаев, М. Т.* Кластеры у воді / *Ж. В. Воронцова, М. Т. Малафаев* // Вісник НТУ «ХПІ»: зб. наук. праць. Тематичний вип. : Нові рішення в сучасних технологіях. – Харків, 2011. – № 43. – С. 3–7.
9. *Малафаев, М. Т.* Температурна залежність теплоємності води / *М. Т. Малафаев* // Прогресивні техніка та технології харчових виробництв, ресторанного господарства і торгівлі : зб. наук. праць / ХДУХТ. – Харків, 2010. – Ч. 2. – С. 459–463.

Малафаев Н. Т.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ САМОДИФФУЗИИ В ВОДЕ

В работе предложена новая методика расчета энергии активации диффузии и проведен расчет температурной зависимости энергии активации диффузии для молекул в чистой воде (самодиффузии) по данным о ее вязкости во всем диапазоне существования жидкой фазы воды – от точки плавления до критической точки. Величина энергии активации характеризует действующие осредненные силы связи между молекулами и определяет их подвижность, имеющую большое значение для свойств воды. Поскольку сама диффузия определяется с большой погрешностью, предложено провести расчет энергии активации, используя более точные данные о ее вязкости. Расчет проведен по модифицированной формуле, применяя не динамическую, а кинематическую вязкость, для которой сохраняется число взаимодействующих молекул в процессе нагрева, а также используя формулу Стокса – Эйнштейна связи вязкости и диффузии. Рассчитана температурная зависимость энергии активации диффузии. Показано, что она содержит два вклада – основной степенной, уменьшающийся к критической точке до нуля и пропорциональный корню второй степени, а также вблизи точки плавления экспоненциальный. Экспоненциальный вклад в энергию активации обусловлен наличием дополнительных взаимодействий молекул в быстро разрушающихся с нагревом кластерах воды. Величина энергии активации диффузии больше

энергии активации вязкости и более медленно убывает с ростом температуры. Данный эффект связан с тем, что при диффузии взаимодействия молекул являются объемными, трехмерными, тогда как при течении постоянно рвутся связи между слоями жидкости, и соответствующими молекулами, и взаимодействия молекул становятся квазидвумерными. Это ведет к большей величине энергии активации для диффузии и более медленному степенному ее уменьшению с ростом температуры, тогда как энергия активации вязкости меньше по величине и убывает линейно к критической точке воды, аналогично силам поверхностного натяжения.

Ключевые слова: молекула воды, подвижность, диффузия, вязкость, течение жидкости, взаимодействие молекул, силы межмолекулярных связей, энергия активации.

Malafayev N. T.

CALCULATION OF THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE ENERGY OF ACTIVATION OF SELF-DIFFUSION IN WATER

In this work, a new method for calculating the activation energy of diffusion was proposed. The temperature dependence of the activation energy of diffusion for molecules in pure water (self-diffusion) was calculated based on data on its viscosity in the entire range of existence of the liquid phase of water - from the melting point to the critical one. The value of the activation energy characterizes the acting averaged bond forces between molecules and determines their mobility, which is of great importance for the properties of water. Since diffusion itself is determined with a large error, it was proposed to calculate the activation energy using more accurate data on its viscosity. The calculation was carried out according to a modified formula, using not dynamic, but kinematic viscosity, for which the number of interacting molecules is conserved during heating, and also using the Stokes - Einstein formula for the relationship between viscosity and diffusion. The temperature dependence of the diffusion activation energy is calculated. It is shown that it contains two contributions - the main power-law one, decreasing to the critical point to zero and proportional to the root of the second power, and also exponential near the melting point. The exponential contribution to the activation energy is due to the presence of additional interactions of molecules in water clusters that rapidly disintegrate with heating. The diffusion activation energy is greater than the viscosity activation energy and decreases more slowly with increasing temperature. This effect is associated with the fact that during diffusion the interactions of molecules are volumetric, three-dimensional, while during the flow, the bonds between the layers of the liquid and the corresponding molecules are constantly broken, and the interactions of the molecules become quasi-two-dimensional. This leads to a larger value of the activation energy for diffusion and a slower power-law decrease with increasing temperature, while the activation energy of viscosity is smaller and decreases linearly to the critical point of water, similar to the surface tension forces.

Keywords: water molecule, mobility, diffusion, viscosity, fluid flow, interaction of molecules, intermolecular bond strength, activation energy.

Стаття надійшла 06.06.2021 р.