

Н. П. Саргаева, П. М. Саргаев

СИНЕРГЕТИКА СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ И ОБРАТИМЫЕ ПЕРЕХОДЫ ИДЕАЛЬНЫЙ КВАНТОВЫЙ ГАЗ — КОНДЕНСАТ ЖИДКОГО ЭТАНА

Получены квантовые волновые масс-спектры частиц жидкого этана для двух уровней энергии равновесного идеального квантового газа: 1) по Эйнштейну и 2) тепловой длины волны. Спектры моделируются системами из двух и более кластеров (атомов, «резонансов» с $N = 2-13$ и более). Кластеры состоят из легких частиц (H, H^+) при температурах тройной точки и тяжелых (CH_3, C_2H_6) — при более высоких. При температурах максимумов теплоемкости (бозонных пиках) системы содержат четное число атомов водорода. Минимумам теплоемкости соответствуют нечетные переменные системы. Линейные участки температурной функции угловой характеристики структуры жидкости представлены рядами модельных систем, содержащих протонные пары при $T = 97 \pm 5K$, частицы CH_3 при $228 \pm 5K$ и C_2H_6 — при $274 \pm 5K$.

Ключевые слова: этан, жидкая фаза, синергетика, контракция, квантовые волновые масс-спектры, модельные системы, резонансы Ефимова с $N = 3-13$; квантовый газ тепловой длины волны, квантовый газ по Эйнштейну, масс-спектры и экстремумы теплоемкости; бозонные пики теплоемкости; масс-спектры и векторы жидкости, гексагональная упаковка, пентагональная координация.

N. P. Sargaeva, P. M. Sargaev

THE SYNERGY OF STRUCTURAL UNITS AND IDEAL QUANTUM GAS - CONDENSATE OF LIQUID ETHANE

Quantum wave mass spectra of liquid ethane particles have been obtained for the two energy levels of equilibrium ideal quantum gas: 1) by Einstein, and 2) with thermal wavelength. The spectra are modeled by the systems of two or more clusters (atoms, "resonances" with $N = 2-13$ and higher). At triple point temperature, the clusters consist of light particles (H, H^+); at higher temperatures, they consist of heavy particles (CH_3, C_2H_6). At the temperatures when the heat capacity yields the maximum (i.e. boson peaks) the systems consist of an even number of hydrogen. The minimum values of heat capacity correspond to the odd variable systems. The linear segments of the temperature function of the liquid structure angular characteristic are represented by a series of model systems which contain proton pairs at $T = 97 \pm 5 K$, CH_3 particles at $228 \pm 5 K$, and C_2H_6 - at $274 \pm 5 K$.

Keywords: ethane, liquid phase, synergy, contraction, quantum wave mass spectra, model systems, Efimov resonance at $N=3-13$; thermal wavelength quantum gas, Einstein quantum gas, mass spectra and extremums of heat capacity; heat capacity boson peaks, mass spectra and vectors of liquid, hexagonal packing, pentagonal coordination.

Группы CH_3 молекулы этана могут совершать конформационные колебания относительно друг друга [2, 3, 17, 21, 25]. Однако в теплопроводности твер-

дого этана не обнаруживаются особенности, связанные с вращением метильных групп. Перенос тепла моделируется низкочастотными фононами и высокочастотными «диффузными» модами [3]. Свойства структуры твердой фазы в значительной мере сохраняются и в жидком состоянии этана в области температур, прилегающих к температуре тройной точки [21], имеющей относительно низкое значение (90,352 К [20]). Изобилие атомов водорода на поверхностях несферической и в то же время компактной молекулы C_2H_6 в условиях не размытой тепловым движением структуры жидкости является привлекательным фактором для моделирования явлений образования протонных пар, а также кластеров с числом атомов три и более. Возможность существования низкоэнергетических систем, состоящих из трех резонансно взаимодействующих частиц, получила обоснование в работах В. Н. Ефимова [14–15] для ядерных процессов. Кластеры, состоящие из трех [15] и более [18, 24] частиц (резонансы Ефимова), проявляются в интерференции ультрахолодных атомов в состоянии разряженных газов [19]. Проявление протонных пар в конденсированной фазе установлено в случае воды [5, 23] в рамках модели структурных единиц жидкости [7, 10] и теории идеального одноатомного квантового газа по Эйнштейну [16]. Отмеченные [5, 7, 10, 23], а также получившие развитие [6, 9] и применение в исследовании метана [8] методики используются в данной работе с целью моделирования структуры и проявлений резонансов Ефимова в жидком состоянии этана.

Некоторые понятия и определения

В качестве критерия оценки возможного образования резонансов Ефимова в жидком состоянии этана используем значение массы кластера, содержащего n , не связанных химически, резонансно взаимодействующих частиц. С увеличением числа частиц в кластере масса кластера возрастает. Взаимодействующие два и более кластера образуют систему. Приведенная масса системы меньше массы легкого кластера и уменьшается с увеличением числа кластеров (например, одинаковых по массе). Значения масс кластеров и систем при различных температурах будем называть спектрами масс.

Масса частиц представлена в атомных единицах массы (а. е. м.).

Использованные значения массы атома водорода (1,00794) и протона (1,00739) соответствуют природному изотопному составу водорода.

Масс-спектры частиц при температуре появления БЭК

Условия, необходимые для появления бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК), в наиболее простой форме представлены в формуле критической температуры (T_c) появления БЭК [1, с. 30]:

$$T_c = (h^2 / (2 \cdot \pi \cdot m \cdot k)) \cdot (n / 2,612)^{2/3}, \quad (1)$$

где m , n — молекулярная масса и концентрация частиц системы (газа); h , k — постоянные Планка и Больцмана.

Если в формулу (1) подставить молекулярную массу этана и характеристики жидкости при температуре тройной точки ($T_{тр}$), то получим значение величины (T_c) на 90 К ниже температуры $T_{тр}$. Следовательно, значения критической

температуры (T_c) могут быть в пределах температур (T , К) существования стабильного состояния жидкости в том случае, когда значения m существенно меньше молекулярной массы этана. Представляя m в (1) в качестве неизвестной переменной величины, приравнявая температуры (T_c) и (T), подставляя известные величины и переходя к атомным единицам массы (а. е. м.), получим формулу

$$m(1) = 1,08521538 \rho^{2/5} / T^{3/5}, \quad (2)$$

где ρ — плотность (в $\text{кг}\cdot\text{м}^{-3}$); $m(1)$ имеет размерность (а. е. м.).

Значения $m(1)$ по (2) соответствуют «одноатомной» системе, в которой не предполагается проявления каждого атома молекулы как самостоятельной частицы. При учете всех (N) атомов молекулы получим формулу

$$m(N) = N^{8/5} \cdot m(1) \quad (3)$$

В случае этана $N = 8$, $m(N) = m(8) = 8^{8/5} \cdot m(1) = 27,857618 \cdot m(1)$.

Формулы (1–3) соответствуют критической температуре (T_c) появления БЭК. В таком случае энергия основной части частиц конденсата больше нулевой; частицы в состоянии с нулевой энергией практически отсутствуют [4, с. 614]. Спектры масс по (2) и (3) являются характеристикой конденсированной фазы, плотность которой используется в расчетах. Значения $m(1)$ и $m(8)$ (см. рис. 1) получены подстановкой в формулы (2) и (3) данных [20] для линии насыщения C_2H_6 -жидкости, значения $m(1)_s$ и $m(8)_s$ — данных для твердой фазы по [2].

Значения $m(1)$ и $m(8)$ связаны постоянным коэффициентом в формуле (3); естественно, что в температурной зависимости этих величин (рис. 1) имеется много общего: обе величины уменьшаются по мере повышения температуры; наиболее высокие коэффициенты корреляции соответствуют полиномам 16 степени, линии тренда которых при экстраполяции в низкотемпературную область повторяют формы кривых, соответствующих твердой фазе $m(1)_s$ и $m(8)_s$.

Классификация масс-спектров по уровням энергии

В данной работе моделируется резонансное взаимодействие частиц C_2H_6 -жидкости на разных уровнях энергии равновесного одноатомного квантового газа. Методика дифференциации частиц конденсата по энергиям без использования модельных потенциалов апробирована в случае H_2O - и D_2O -воды в работах [5, 23]. Согласно такой методике, энергия конфигурационных колебаний $E_c = m \cdot C_{\text{зв}}^2$ частиц жидкости, участвующих в обратимых переходах квантовый газ — БЭК, приравнивается значениям энергии колебаний частиц равновесного квантового газа $E_{i.g.} = (C_p/C_v) k \cdot T$, где $C_{\text{зв}}$ — скорость звука в жидкости; C_p/C_v — показатель адиабаты; C_p и C_v — изобарная и изохорная теплоемкость квантового газа. В данной работе в качестве неизвестной величины выбираем значение массы частиц жидкости

$$m = (C_p/C_v) \cdot k \cdot T / C_{\text{зв}}^2, \quad (4)$$

которая, как и энергия колебаний частиц равновесного квантового газа, оказывается в зависимости от показателя адиабаты.

Для дифференциации (и индекса обозначений) массы частиц жидкости m по формуле (4) используем четыре уровня энергии [5], которым соответствуют

значения адиабаты равновесного квантового газа: $(C_p/C_v)_1 = 1$ — уровень (1) для квантового газа с критической адиабатой; $(C_p/C_v)_2 = 3/2$ и $(C_p/C_v)_3 = (5/3)$ — уровни насыщенного (2) и предельного ненасыщенного (3) идеального одноатомного квантового газа по Эйнштейну [16]; $(C_p/C_v)_4 = 2 \cdot \pi$ — уровень (4) квантового газа с тепловой длиной волны частиц.

Значения m_2, m_3, m_4 для C_2H_6 -жидкости на линии насыщения, полученные подстановкой в формулу (4) данных по [20], приведены на рис. 1 в зависимости от температуры (T, K).

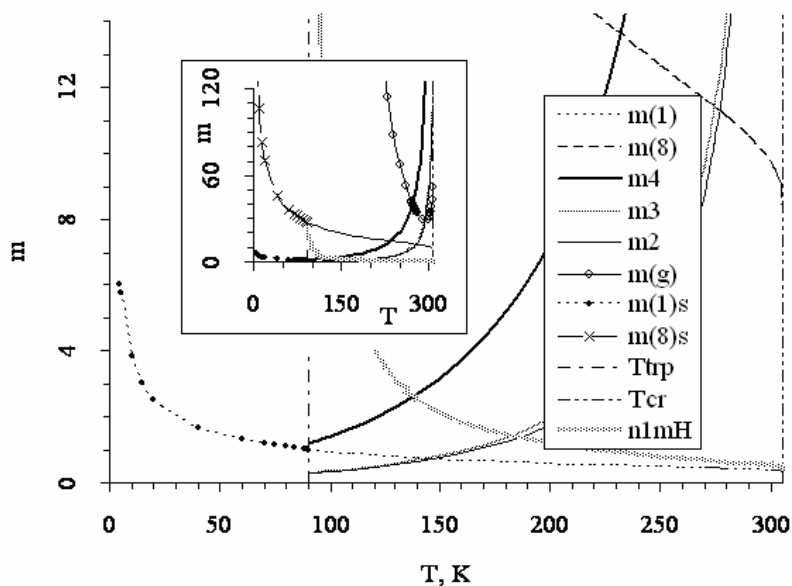


Рис. 1. Зависимость от температуры (T, K) найденных по формулам (2–4) модельных значений масс (m) частиц этана C_2H_6 на линии насыщения жидкости ($m_g, m(1), m(8), m_2, m_3, m_4$) и твердой фазы ($m(1)_s, m(8)_s$); структурных единиц (m_g); для уровней энергии тепловой длины волны (m_4), равновесного насыщенного (m_2) и предельно ненасыщенного (m_3) квантового газа по Эйнштейну [16]; для одноатомной ($m(1), m(1)_s$) и 8-атомной ($m(8), m(8)_s$) модели жидкости при условиях появления БЭК (T_{cr}, T_{tr} — критическая и тройной точки температура соответственно)

Моделирование структуры C_2H_6 -жидкости

Для интерпретации масс-спектров в широкой области температур необходима дополнительная информация о строении жидкости. В данной работе для этих целей использовали особенности температурной зависимости теплоемкости C_2H_6 -жидкости на линии насыщения (см. рис. 2) и результаты оригинальной методики векторного анализа структуры C_2H_6 -жидкости, которая предложена нами в работе [9], дополнена [5] и апробирована в случае H_2O [9], D_2O [6] и CH_4 [8].

Синергетика структурных единиц сопровождается контракцией жидкости, в процессе которой молекулы, находящиеся на поверхностях структурных единиц, проникают в междоузлия соседних частиц. Происходит дифференциация молекул на два типа (в узлах — тип 1 и междоузлиях — тип 2). Молекулы типа 1 характеризуются фракцией (долей, f_1) и координационными числами (z_1). Ха-

характеристики молекул типа 2 имеют обозначения f_2, z_2 . Фракции связаны формулой $f_1 + f_2 = 1$. Векторная сумма координационных чисел (z_1, z_2) молекул двух типов совпадает с координационным числом молекул первой координационной сферы (z) жидкости. Угол (F_1), противолежащий стороне (z_1) в треугольнике, образованном векторами (z, z_1, z_2), находится по теореме косинусов. Контракция жидкости связана с давлением $P_g = \sigma / (r \cdot g^{1/3})$, где σ — поверхностное натяжение, r — радиус молекул и g — число молекул в структурной единице. Методика оценки значений (g), использованная в данной работе, совпадает с таковой [8] с той лишь разницей, что значение коэффициента f_{01} в соотношении (4, [8]) принято равным 1. Для оценки коэффициента f_{01} рассчитывали значение величины (g) при температуре тройной точки этана ($g = 413$) по методике [10] из соотношения значений плотностей твердой и жидкой фаз этана, взятых по [2, 13, 20, 25]. С ростом температуры число молекул в структурных единицах этана проходит через минимум при 290–300 К. Значения массы структурных единиц (m_g), соответствующие области температур минимума $g(T)$, приведены на рис. 1.

Наибольшие различия структуры этана и метана [8] на линии насыщения жидкости проявляются в температурной зависимости угловых характеристик. В случае этана линия тренда ($F_1(T)$) угла, противолежащего стороне z_1 , имеет линейные участки и изломы. Линейным участкам соответствуют высокие значения коэффициента корреляции (r^2). На рис. 3 приведены значения r^2 в виде отклонения от 1 ($Y = (1 - r^2) \cdot 10^4$) для функции ($F_1(T)$). Коэффициент (r^2) оценивали по 50 точкам. Значения F_1 определяли через каждые 0,2 К. Приведенные на рис. 3 значения, таким образом, относятся к интервалу температур 10 К. Отличие касается лишь одной точки, выделенной на рис. 3, для которой использован интервал 0,2 К. В каждом случае при определении коэффициента корреляции (r^2) получали линейное уравнение $F_1 = A_0 + A_1 \cdot T$, в котором коэффициенты (A_0, A_1) сложным образом зависят от температуры. Значения коэффициента A_0 приведены на рис. 4.

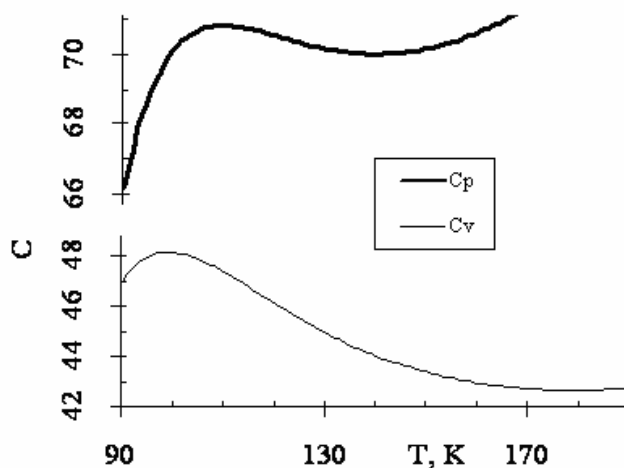


Рис. 2 Теплоемкость (C , Дж/моль) изобарная (C_p) и изохорная (C_v) на линии насыщения C_2H_6 -жидкости по данным [20] при температурах (T , К)

Для интерпретации масс-спектров, полученных в данной работе, численные значения массы «привязывали» к экстремумам в температурных зависимостях теплоемкостей и угловых характеристиках структуры. Из рис. 2 следует, что в случае теплоемкости этана на линии насыщения жидкости имеются две температуры, соответствующие максимумам, и две — минимумам теплоемкости. Максимумы прилегают к температуре тройной точки, а минимумы находятся в более высокотемпературной области. Наиболее удален от температуры тройной точки минимум $C_v(T)$. При дальнейшем повышении температуры значения C_p и C_v возрастают.

Максимальным значениям коэффициента корреляции r^2 , представленным на рис. 3, соответствуют нулевые значения Y , которые периодически повторяются по мере повышения температуры. Первый максимум (r^2) «прилегает» к температуре тройной точки, подобно максимумам теплоемкости. Второму и третьему соответствуют температуры 228 К и 274,2 К.

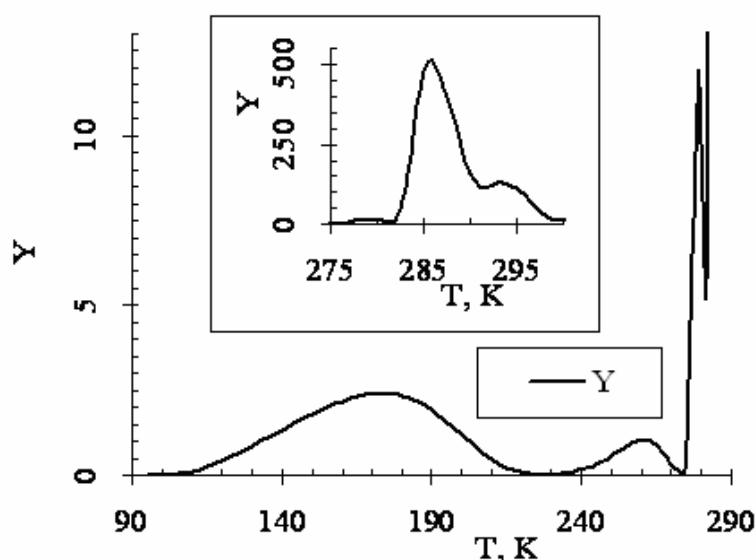


Рис. 3. Коэффициент корреляции (r^2), представленный в виде отклонения от единицы $(1-r^2) \cdot 10^4$, (Y) линейности температурной функции угла ($F_1(T)$), противоположного стороне z_1 векторного треугольника координационных чисел z , z_1 и z_2 этана на линии насыщения жидкости в зависимости от температуры (T , К)

Область температур *первого минимума* (r^2), более глубокого и протяженно-го по сравнению со вторым, практически перекрывается с областью температур *минимума теплоемкости* C_v . Волнообразные изменения структуры жидкого этана наиболее ярко проявляются в значениях коэффициента A_0 , представленного на рис. 4. Коэффициент A_0 характеризует структуру, которую формируют в процессе охлаждения жидкости молекулы типа 1, находящиеся в узлах решетки. При температурах, соответствующих максимумам $r^2(T)$, система «стремится формировать» гексагональную упаковку, которой соответствует характерный угол 60° . Областям температур минимума $r^2(T)$ более характерна пентагональная координация, которой соответствует угол 72° .

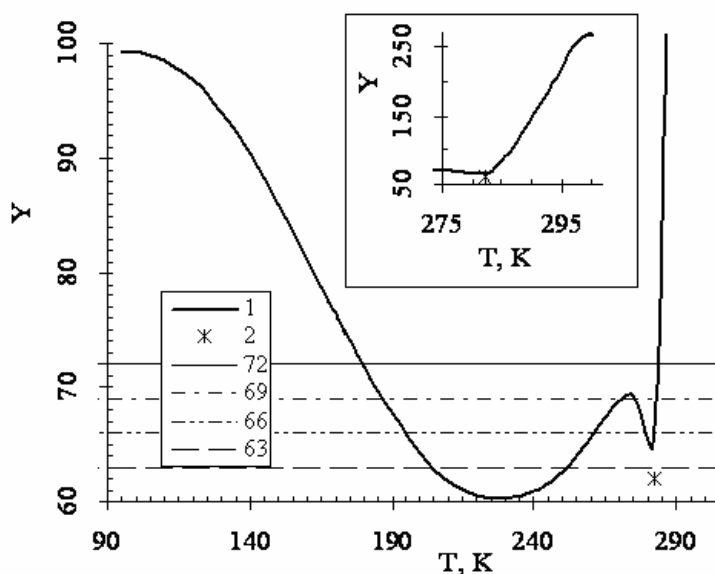


Рис. 4. Коэффициент A_0 (Y , градус) линейного уравнения температурной зависимости угла $F_1(T)$, противоположащего стороне z_1 треугольника векторов координационных чисел z_1, z_1, z_2 C_2H_6 -жидкости на линии насыщения в зависимости от температуры (T , К): для построения использовано 50 точек в интервале температур 10 К (1) и две точки в интервале 0,2 К (2); 72 — угол, характерный пентагональной упаковке; 63, 66, и 69 — значения углов (градус) в промежутке от 60° до 72°

Структуре, которая формируется при охлаждении жидкости в области температур тройной точки, соответствует угол, близкий к 100° . Это значение соответствует среднему геометрическому характерных углов (90° и 109°) объемно центрированной кубической решетки, которая обнаружена в твердой фазе при температурах, близких к тройной точке этана [2, 12, 25].

Совпадения и пересечения масс-спектров

Линия тренда значений $m(1)$ (см. рис.1) пересекает кривую $m_3(T)$, соответствующую предельному ненасыщенному квантовому газу по Эйнштейну [16], при температуре 139 К, которая совпадает с температурой минимума изобарной теплоемкости $C_p(T)$ (см. рис. 2). Пересечение спектров $m(1)$ и $m_2(T)$ находится при 145 К — попадает в область температур начала температурного подъема значений $C_p(T)$. Тем не менее *соотношение значений $m(1)$ и m_2* проявляется при температурах минимума теплоемкости, что подробно рассмотрено в разделе «Масс-спектры и минимумы функций $C_p(T)$ и $C_v(T)$ ». В альтернативном случае значения $m(1)$ могут быть получены как приведенные массы системы двух тел ($1H; n1mH$), первое из которых имеет массу атома водорода, тогда как масс-спектр $n1mH(T)$ имеет три замечательных пересечения (см. рис. 1): при температуре тройной точки значение $n1mH$ совпадает с $m(8)$ (первое пересечение), по мере повышения температуры $n1mH$ резко уменьшаются, в области температур перехода в более спокойный режим температурного падения испытывают второе пересечение (с кривой $m_4(T)$) и третье — с кривыми $m_3(T)$ и $m_2(T)$. Первое пересечение не требует комментариев, второе и третье соответствуют темпера-

турам минимума теплоемкости (см. рис. 2), низкотемпературное соответствует температуре минимума изобарной $C_p(T)$, а высокотемпературное — изохорной $C_v(T)$.

В то время как $m(1)$ и $m(8)$ уменьшаются по мере повышения температуры, значения m_2 , m_3 , m_4 возрастают (в ортобарных условиях в 379 раз при повышении температуры от тройной точки (90,352 К) до критической температуры (305,33 К)). Пересечения линии тренда температурной зависимости значений $m(8)$ наблюдаются при температурах 230 К (с линией $m_4(T)$, рис. 1) и 274 К — с кривыми $m_3(T)$ и $m_2(T)$. Оба значения совпадают с температурами максимумов коэффициента корреляции r^2 , представленного на рис. 3, которые, в свою очередь, соответствуют температурам наиболее линейных участков температурной зависимости значений угла $F_1(T)$, противолежащего стороне z_1 треугольника, образованного векторами z , z_1 , z_2 координационных чисел C_2H_6 -жидкости на линии насыщения.

Масс-спектры и бозонная природа максимумов теплоемкости

Причины возникновения экстремумов теплоемкости (и других функций) в связи с масс-спектрами необходимо искать в особенностях модельных систем, поскольку из рис. 1 следует, что в самих масс-спектрах таковые отсутствуют. При температурах от тройной точки до 122 К масса частиц с тепловой длиной волны (m_4) меньше числа 2 и может моделироваться как приведенная масса системы двух и более кластеров, в которой легкий кластер содержит два протона (или атома водорода) — *2H-системы*. Установленное в данной работе проявление протонных пар в теплоемкости C_2H_6 -жидкости согласуется с выводами [5, 23] для воды. Однако между двумя сравниваемыми фактами имеются различия: Протонные пары H_2O -воды проявляются на уровне энергии квантового газа по Эйнштейну, а в случае C_2H_6 -жидкости — на уровне квантового газа с тепловой длиной волны. Отмеченное различие не изменяет квантовую природу протонной пары — в том и другом случае протонная пара относится к классу бозонов. В связи с этим максимум теплоемкости C_2H_6 -жидкости при температуре 99 К может рассматриваться как *бозонный пик*.

Бозонный вклад в теплоемкость при температурах в области максимума $C_v(T)$ (*бозонная природа*) подтверждается также повышением *четности модельной системы* по мере повышения температуры и приближения к максимуму $C_v(T)$ в области низкотемпературного крыла: при температуре тройной точки модельная система имеет *четно-нечетный* состав (2H; 3H), а в непосредственной близости к максимуму $C_v(T)$ — *четно-четный* (2H; 4H). Система (2H; 4H) является *критической четно-четной*: В следующей (2H; 6H) имеются «вероятностные проблемы», так как *суммарное число атомов водорода* выходит за пределы числа таковых в *двух метильных группах*, следствием чего может быть понижение теплоемкости. В эквивалентной системе (3H; 3H) такие проблемы отсутствуют, но имеются чисто квантовые причины возможности понижения теплоемкости жидкости. Кластеры 3H содержат нечетное число атомов водорода или протонов. В последнем случае (который более вероятен из-за различия электроотрицательностей атомов водорода и углерода) кластеры 3H (или некоторые из них) могут быть отнесены к числу фермионов. Интерференция фер-

мионов приводит к понижению амплитуды колебаний частиц [11, с. 31], следствием чего может быть затухание колебаний частиц и понижение теплоемкости жидкости.

Понижение изохорной теплоемкости с ростом температуры происходит столь интенсивно, что это существенно влияет на температурный ход изобарной теплоемкости $C_p(T)$ жидкости, которая вслед за теплоемкостью $C_v(T)$ уже при температурах выше 109,7 К начинает уменьшаться по мере повышения температуры. При 109,7 К значение $m_4 = 1,6381$ моделируется системой (2Н; 10Н; 2М), в которой сумма атомов водорода (в кластерах 2Н; 10Н) равна 12, что соответствует двум молекулам этана. При дальнейшем увеличении числа атомов водорода системы как *четно-четной* возникают вероятностные проблемы вовлечения в *когерентное движение* атомов третьей молекулы, то есть система критическая. В области максимумов $C_v(T)$ и $C_p(T)$ модельные системы m_4 -спектра являются *подобными* и характеризуются как *четно-четные критические по водороду* (C_v — на моно-, C_p — бимолекулярных уровнях), что *доказывает бозонную природу максимумов* теплоемкости C_2H_6 -жидкости на линии насыщения.

Масс-спектры и природа минимумов функций $C_p(T)$ и $C_v(T)$

При температуре 178,6 К, которая, по данным [20], попадает в область минимума $C_v(T)$, значение m_2 (1,2073) в два раза превышает величину m_1 (0,6039). Отметим, что при этом значение m_4 соответствует массе *пяти атомов водорода* и может быть получено как приведенная масса системы двух кластеров, масса первого из которых равна массе *шести атомов водорода (протонов)*, а второго — массе одной молекулы этана (6Н; 1М).

Проявление шестиатомного «резонанса Ефимова» (6Н), как и *10-атомного* (10Н), уже само по себе представляет важное для квантовой механики явление. Однако не менее важно то, что добавление еще одного кластера (1М) к системе (6Н; 1М) вызывает *декогеренцию* кластера 6Н и повышает *вариабельность* модельной системы. Значения приведенной массы вслед за вариациями состава модельной системы скачкообразно достигают таковых для частиц предельного ненасыщенного одноатомного квантового газа по Эйнштейну $m_3(T)$ при температурах минимума теплоемкости C_v жидкого этана. Например, *нечетно-нечетной* системе (3Н; 3Н; 1М; 1М) (или (3Н; 3Н; 1СН₃)) соответствуют значения приведенной массы от 1,3731 до 1,3738. Нижний предел получен при оценке массы кластера 3Н по массе протона, верхний — атома водорода. Оба результата соответствуют значениям величины m_3 в области температур минимума $C_p(T)$, а при увеличении числа кластеров с массой молекулы этана в модельной системе смещаются к линии тренда $m_2(T)$ в рассматриваемой области температур. В пределе — при достижении значений спектра масс $m_2(T)$ в области температур минимума $C_p(T)$ — модельная система состоит из двух кластеров 3Н и пяти кластеров 1М. При этом приведенная масса пяти кластеров 1М (6,0138) близка половине атомной массы углерода и модельная система может быть заменена эквивалентной (3Н; 3Н; 1С; 1С), в которой *суммарная масса* кластеров совпадает с молекулярной массой этана. В случае, когда в модельной системе (3Н; 3Н; 1С; 1С), кластеры 3Н состоят из протонов, а кластеры 1С — из

атомов углерода с зарядом -3 , приведенная масса оказывается равной $1,20733$, совпадающей с m_2 при температуре $178,6$ К. Значение, равное половине массы $1,20733$, ($0,60367$) совпадает с $m(1)$ при этой же температуре. Следовательно, при температуре минимума изохорной теплоемкости на линии насыщения жидкости масса m_2 *частиц конденсата*, участвующих в *обратимых переходах в равновесный насыщенный идеальный одноатомный квантовый газ по Эйнштейну*, может быть найдена как приведенная масса модельной системы (3Н; 3Н; 1С; 1С). При той же температуре в условиях появления БЭК масса частиц $m(1)$, рассчитанная по формуле (2), может быть получена как приведенная масса *двух модельных систем* того же состава, что и для m_2 , (3Н; 3Н; 1С; 1С).

Нечетность по водороду и вариабельность модельных систем при температурах *минимума* $C_V(T)$, которые подробно рассмотрены выше, являются основными свойствами модельных систем и при *температурах минимума* $C_p(T)$ ($139,8$ К). Например, значение $m_4 = 2,6848$ в этих условиях моделируется системами: (3Н; 1М-6Н), (4Н; 8Н), (5Н; 7Н; 1М), ((6Н; 6Н) \equiv 3Н; 1М-6Н). Проявление систем *без водородных кластеров* (например, только с *метильными кластерами*) характеризует модельные системы при *температурах минимумов* $C_p(T)$ и $C_V(T)$ (и более высоких) как *вариабельные*.

При постоянной температуре m_2 , m_3 и m_4 , связаны друг с другом постоянством отношений показателей адиабаты; причем среднее значение m_2 и m_3 практически в 4 раза меньше, чем m_4 . Следовательно, обнаруженный при температурах минимума $C_V(T)$ механизм переходов масс-спектров $m_4(T) \leftrightarrow m_3(T)$ и $m_4(T) \leftrightarrow m_2(T)$, основанный на модифицировании модельной системы, имеет универсальный характер.

Масс-спектры и структура

Модельные системы масс-спектра m_4 , соответствующие температурам максимумов Γ^2 , можно *сравнивать по трем точкам*, две из которых находятся на расстоянии ± 5 К от температуры максимума Γ^2 , поскольку последний определяется на участке 10 К. Такое сравнение дает для модельных систем при 228 ± 5 К *ряд* (1СН₃; 3СН₃), (1СН₃; 5СН₃), (1СН₃; 13СН₃), который *повторяется* при $274,2 \pm 5$ К (2М; 3М), (2М; 5М), (2М; 13М) и при $96,6 \pm 5$ К $-(1,5Н; 3(2Н))$, (1,5Н; 5(2Н)), (1,5Н; 13(2Н)). В последнем случае вторые кластеры состоят из протонных пар и классифицируются как бозоны, тогда как первый кластер — может быть представлен эквивалентными системами (2Н; 6Н) и (3Н; 3Н), которые, как уже отмечалось, не эквивалентны с позиций квантовой механики: в первом случае преобладают свойства бозонов, во втором — фермионов.

Квантовые волновые масс-спектры частиц жидкого этана, соответствующие уровням энергии частиц квантового газа по Эйнштейну и тепловой длины волны, моделируются системами из двух и более кластеров (атомов, *резонансов* с $N = 2-13$ и более) преимущественно водородного состава в области температуры тройной точки и более тяжелых частиц (СН₃, С₂Н₆) — при более высоких температурах. Бозонная природа максимумов теплоемкости характеризуется системами — четными по числу атомов водорода при температурах максимумов теплоемкости и нечетными вариабельными — в области минимумов теплоемкости. Линейные участки температурной функции угловой характеристики струк-

туры жидкости могут быть интерпретированы рядами модельных систем, содержащих протонные пары при температуре 97 К, частицы CH_3 при 228 К и C_2H_6 — при 274 К.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Гринштейн Дж., Зайонц А.* Квантовый вызов. Современные исследования оснований квантовой механики. Долгопрудный: Интеллект. 2008. 400 с.
2. *Клименко Н. А., Гальцов Н. Н., Прохватилов А. И.* Структура, фазовые переходы и тепловое расширение этана C_2H_6 // *Физика низких температур.* 2008. Т. 34. №12. С. 1319–1326.
3. *Константинов В. А., Ревякин В. П., Саган В. В.* Вращение метильных групп и теплопроводность молекулярных кристаллов: этан // *Физика низких температур.* 2006. Т. 32. № 7. С. 905–912.
4. *Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А.* Курс теоретической физики. Т. 2. М.: Наука, 1971. 936 с.
5. *Саргаева Н. П., Барышев А. Н., Саргаев П. М.* Бозоно-фермионные контрасты синергетики структурных единиц жидких D_2O и H_2O // *Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки.* 2009. Т. 95. С. 120–133.
6. *Саргаева Н. П., Наймушин А. Б., Саргаев П. М.* Синергетика структурных единиц и термодинамические свойства D_2O жидкости // *Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки.* 2008. Т. 9(48). С. 44–60.
7. *Саргаева Н. П., Саргаев П. М.* Кластеры — суть структуры жидкого состояния воды // *Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки.* 2007. Т. 7(26). С. 112–126.
8. *Саргаева Н. П., Саргаев П. М.* Синергетика структурных единиц и равновесие двух типов молекул жидкого метана // *Известия РГПУ им. А.И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки.* 2010. №. 122. С. 73–84.
9. *Саргаева Н. П., Саргаев П. М.* Координационно-угловое распределение молекул воды в растворах // *Всероссийский симпозиум «Эффекты среды и процессы комплексообразования в растворах»:* Тезисы докладов. Красноярск. 2006. С. 193–194.
10. *Саргаев П. М.* Проявление структуры воды в электрофизических свойствах биосистем и методы мониторинга: Автореф. дис. ... д-ра хим. наук. СПб., 1999. 39 с.
11. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс Р.* Фейнмановские лекции (вып. 8, 9). М.: Мир. 1978. 528 с.
12. *Amoureux J. P., Foulon M., Muller M. and Bee M.* Structures of Ethane, Hexamethylethane and Hexamethyldisilane in their Plastic Phases // *Acta Crystallography.* 1986. Vol. B 42. P. 78–84.
13. *Atake T., Chihara H.* Calorimetric study of the phase changes in solid ethane // *Chem. Lett.* 1976. № 7. P. 683–688.
14. *Efimov V.* Energy Levels arising from Resonant Two-Body Forces in a Three-Body System // *Phys. Lett.* 1970. Vol. B33. № 8. P. 563–564.
15. *Efimov V.* Low-Energy Properties of Three Resonantly Interacting Particles // *Sov. J. Nucl. Phys.* 1979. Vol. 29(4), April. 546–553.
16. *Einstein A.* Quantentheorie des einatomigen idealen Gases // *Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., Phys.-math. Kl.,* 1925. S. 3–14.
17. *Kemp J. D., Pitzer K. S.* The Entropy of Ethane and the Third Law of Thermodynamics. Hindered Rotation of Methyl Groups // *J. Am. Chem. Soc.* 1937. Vol. 59ю №. 2. p. 276–279.
18. *Knoop S., Ferlaino F., Mark M., Berninger M., Schöbel H., Nägerl H.-C. & Grimm R.* Observation of an Efimov-like trimer resonance in ultracold atom–dimer scattering // *arXiv:0807.3306v1 [cond-mat.other]* 21 Jul 2008. 12 p.

19. *Kraemer T., Mark M., Waldburger P., Danzl J. G., Chin C., Engeser B., Lange A. D., Pilch K., Jaakkola A., Nägerl H.-C. and Grimm R.* Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms // *Nature*. 2006. Vol. 440. 16 March. P. 315–318.
20. NIST Standard Reference Database Number 69, June 2005 Release.
21. *Pursky O. I., Sysyov V. M.* Thermal conductivity of simple molecular substances at crystal-liquid phase transition // *Bulletin of University of Kyiv Series: Physics & Mathematics*. 2009. Vol. 2. 6 p.
22. *Sargaeva N. P., Baryshev A. N., Puchkov L. V., Sargaev P. M.* The speed of sound and water structural units // *XVII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. Abstracts*. Vol. 1. Kazan, Russian Federation. June 29 – July 3, 2009. P. 210.
23. *Sargaeva N. P., Baryshev A. N., Puchkov L. V., Sargaev P. M.* Heat capacity bose-fermi contrasts of D₂O and H₂O liquids // *XVII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. Abstracts*. Vol. 1. Kazan, Russian Federation. June 29 – July 3, 2009. P. 210.
24. *Wang X. P.* On the existence of the N-body Efimov effect // *J. Funct. Analysis*. 2004. Vol. 209. P. 137–161.
25. *Younglove B. A., Ely J. F.* Thermophysical properties of fluids. II. Methane, ethane, propane, isobutane and normal butane // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1987 Vol. 16. P. 577–798.

REFERENCES

1. *Grinshtejn Dzh., Zajonc A.* Kvantovyy vyzov. Sovremennye issledovaniya osnovanij kvantovoj mehaniki. Dolgoprudnyj: Intellekt. 2008. 400 s.
2. *Klimenko N. A., Gal'cov N. N., Prohvatilov A. I.* Struktura, fazovye perehody i teplovoe rasshirenie jetana S₂N₆ // *Fizika Nizkih Temperatur*. 2008. T. 34. № 12. S. 1319–1326.
3. *Konstantinov V. A., Revjakin V. P., Sagan V. V.* Vrawenie metil'nyh grupp i teploprovodnost' molekulyarnyh kristallov: jetan // *Fizika nizkih temperatur*. 2006. T. 32. №. 7 C. 905– 912.
4. *Levich V.G., Vdovin JU. A., Mjamlin V. A.* Kurs teoreticheskoy fiziki. T. 2. M.: Nauka, 1971. 936 s.
5. *Sargaeva N. P., Baryshev A. N., Sargaev P. M.* Bozono-fermionnye kontrasty sinergetiki strukturnyh edinic zhidkih D₂O i H₂O // *Izvestija RGPU im. A. I. Gercena: Nauchnyj zhurnal: Estestvennye i tochnye nauki*. 2009. T. 95. C. 120–133.
6. *Sargaeva N. P., Najmushin A. B., Sargaev P. M.* Sinergetika strukturnyh edinic i termodinamicheskie svojstva D₂O zhidkosti // *Izvestija RGPU im. A. I. Gercena: Nauchnyj zhurnal: Estestvennye i tochnye nauki*. 2008. T. 9(48). C. 44–60.
7. *Sargaeva N. P., Sargaev P. M.* Klasteriy — sut' struktury zhidkogo sostojanija vody // *Izvestija RGPU im. A. I. Gercena: Nauchnyj zhurnal: Estestvennye i tochnye nauki*. 2007. T. 7(26). S. 112–126.
8. *Sargaeva N. P., Sargaev P. M.* Sinergetika strukturnyh edinic i ravnovesie dvuh tipov molekul zhidkogo metana // *Izvestija RGPU im. A. I. Gercena: Nauchnyj zhurnal: Estestvennye i tochnye nauki*. 2010. №. 122. S. 73–84.
9. *Sargaeva N. P., Sargaev P. M.* Koordinacionno-uglovoe raspredelenie molekul vody v rastvorah // *Vserossijskij simpozium «JEffekty sredy i processy kompleksoobrazovanija v rastvorah»*: Tezisy dokladov. Krasnojarsk. 2006. S.193–194.
10. *Sargaev P. M.* Projavlenie struktury vody v jelektrofizicheskikh svojstvah biosistem i metody monitoringa: Avtoref. dis. ... d-ra him. nauk. SPb., 1999. 39 s.
11. *Fejnman R., Lejton R., Sjends R.* Fejnmanovskie lekcii (vyp. 8, 9). M.: Mir. 1978. 528 s.
12. *Amoureux J. P., Foulon M., Muller M. and Bee M.* Structures of Ethane, Hexamethylethane and Hexamethyldisilane in their Plastic Phases // *Acta Crystallography*. 1986. Vol. B42. P. 78–84.
13. *Atake T., Chihara H.* Calorimetric study of the phase changes in solid ethane // *Chem. Lett*. 1976. № 7. P. 683–688.

14. *Efimov V.* Energy Levels Arising from Resonant Two-Body Forces in a Three-Body System // Phys. Lett. 1970. Vol. B33. № 8. P. 563–564.
15. *Efimov V.* Low-Energy Properties of Three Resonantly Interacting Particles // Sov. J. Nucl. Phys. 1979. Vol. 29(4), April. 546–553
16. *Einstein A.* Quantentheorie des einatomigen idealen Gases // Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., Phys.-math. Kl., 1925. S. 3–14.
17. *Kemp J. D., Pitzer K. S.* The Entropy of Ethane and the Third Law of Thermodynamics. Hindered Rotation of Methyl Groups // J. Am. Chem. Soc. 1937. Vol. 59, No. 2. p. 276–279.
18. *Knoop S., Ferlaino F., Mark M., Berninger M., Schöbel H., Nägerl H.-C. & Grimm R.* Observation of an Efimov-like trimer resonance in ultracold atom–dimer scattering // arXiv:0807.3306v1 [cond-mat.other] 21 Jul 2008. 12 p.
19. *Kraemer T., Mark M., Waldburger P., Danzl J. G., Chin C., Engeser B., Lange A. D., Pilch K., Jaakkola A., Nägerl H.-C. and Grimm R.* Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms // Nature. 2006. Vol. 440. 16 March. P. 315–318.
20. NIST Standard Reference Database Number 69, June 2005 Release.
21. *Pursky O. I., Sysoev V. M.* Thermal conductivity of simple molecular substances at crystal-liquid phase transition // Bulletin of University of Kyiv Series: Physics & Mathematics. 2009. Vol. 2. 6 p.
22. *Sargaeva N. P., Baryshev A. N., Puchkov L. V., Sargaev P. M.* The speed of sound and water structural units // XVII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. Abstracts. Vol. 1. Kazan, Russian Federation. June 29 – July 3, 2009. P. 210.
23. *Sargaeva N. P., Baryshev A. N., Puchkov L. V., Sargaev P. M.* Heat capacity bose-fermi contrasts of D₂O and H₂O liquids // XVII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. Abstracts. Vol. 1. Kazan, Russian Federation. June 29 – July 3, 2009. P. 210.
24. *Wang X. P.* On the existence of the N-body Efimov effect // J. Funct. Analysis. 2004. Vol. 209. P. 137–161.
25. *Younglove B. A., Ely J. F.* Thermophysical properties of fluids. II. Methane, ethane, propane, isobutane and normal butane // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1987. Vol. 16. P. 577–798.