

冻土学的地球物理和化学基础

冻土学原理

第一册

Principles of Geocryology

〔俄〕Э.П.叶尔绍夫 主编

刘经仁 译

童伯良 校



兰州大学出版社
LANZHOU UNIVERSITY PRESS



冻土学的地球物理和化学基础

冻土学原理

第一册

Principles of Geocryology

〔俄〕B. B. 叶尔绍夫 主编

刘经仁 译

童伯良 校



兰州大学出版社
LANZHOU UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

冻土学的地球物理和化学基础 / (俄罗斯)3. Д. 叶尔绍夫主编; 刘经仁译. —兰州: 兰州大学出版社, 2015. 7

(冻土学原理; 1)

ISBN 978-7-311-04791-7

I. ①冻… II. ①叶… ②刘… III. ①冻土学—地球物理学 ②冻土学—化学 IV. ①P642.14 ②P3 ③06

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 155096 号

责任编辑 魏春玲 张国梁 张 萍

封面设计 郇 海

书 名	冻土学的地球物理和化学基础
作 者	〔俄〕3. Д. 叶尔绍夫 主编 刘经仁 译
出版发行	兰州大学出版社 (地址: 兰州市天水南路 222 号 730000)
电 话	0931-8912613(总编办公室) 0931-8617156(营销中心) 0931-8914298(读者服务部)
网 址	http://www.onbook.com.cn
电子信箱	press@lzu.edu.cn
印 刷	甘肃兴方正彩色数码快印有限公司
开 本	787 mm × 1092 mm 1/16
印 张	16.5
字 数	297 千
版 次	2015 年 7 月第 1 版
印 次	2015 年 7 月第 1 次印刷
书 号	ISBN 978-7-311-04791-7
定 价	68.00 元

(图书若有破损、缺页、掉页可随时与本社联系)

中文版序

多年冻土占据了地球陆地面积的 25%。俄罗斯是地球上多年冻土分布面积最大的国家,其国土面积的 65% 分布有多年冻土。俄罗斯是开展多年冻土研究最早的国家,早在 1757 年就发表了冻土研究的科学文章,并在一百多年前就建成了跨越 2200 km 多年冻土的西伯利亚大铁路。俄罗斯也是最早成立专门的冻土研究机构,开展系统的科学研究和工程实践,把冻土研究提升为一门科学的国家。俄罗斯出版过一系列的冻土学专著和教科书,摆在我们面前的这套系列巨著则集以往成果之大成,全面、系统地总结了冻土学及其各分支学科的基本学术方向,代表了冻土研究的世界水平。这套系列巨著共分六册,现将每册的内容简介如下,从中也可领略俄罗斯构筑的冻土学体系的博大精深。

第一册 冻土学的地球物理和化学基础

冻土是一个复杂(多组分、多相、多孔隙)的物理化学系统,它包含能互相转换的三相水(未冻水、冰、水汽),所以冻土的性状非常易变。这一学术方向就是要研究自然界正冻、已冻和正融过程中冻土性状变化的规律和特点,是冻土学的重要理论基础。

第二册 成岩冻土学(冷生岩石学)

多年冻土区的成岩因素和过程在风化、搬运、沉积和岩化各阶段与非冻土区有着重大的、本质上的差别。冻土区的成岩结果也十分特殊(粉尘性、冰角砾岩、冷生结构、特殊的矿物和岩石组合等),是一种特殊的、独立的沉积成岩类型,由此产生了一种新的岩石学理论——冷生岩石学。

第三册 区域冻土学和历史冻土学

这一学术方向研究季节冻土层、多年冻土层以及冻土地质过程和现象的发生和发展历史,其分布和组构的地带性和区域性规律。本册还研讨了地球以外的太阳系行星及其卫星上的冷生岩土带。

第四册 动力冻土学

用热力学和热物理学的理论和方法研究季节冻土和多年冻土及其伴生的冻土地质现象形成、变化规律和预报方法。

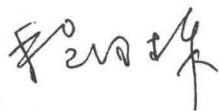
第五册 工程冻土学

研究工程建筑与多年冻土之间的热学、力学和化学相互作用的理论,制订工程冻土预报及调控方法,提出冻土区各种工程建筑设计、施工和运营的工程地质保障。

第六册 冻土预报和冻土带的生态问题

冻土对气温变化及人为影响高度敏感,极易发生变化。冻土区的生态系统也十分脆弱,一旦破坏极难恢复。所以必须对自然(全球变暖)和人为(经济开发)影响下冻土及其上生态系统的可能变化做出预报,及时采取必要的保护措施。

中国是地球上多年冻土分布的第三大国,但冻土研究直到新中国成立后才得以开展。几十年来中国的冻土研究得到了长足的发展,特别是青藏铁路的成功建成,使中国的工程冻土研究在国际上占有了一席之地,但冻土学理论的研究仍亟待提升。西部大开发和东北复兴对中国的冻土研究提出了更高的要求,尤其在全球转暖的情况下,冻土研究面临着极大的挑战,必须回答冻土对全球化转暖的响应和反馈问题,提出必要的应对措施。相信这套系列巨著的翻译、出版,将对中国冻土研究水平的提高起到重要的推动作用。



2015.2.12

译者的话

《冻土学原理》是俄罗斯国立莫斯科大学地质系地冰(冻土)教研室前主任 Э. Д. Ершов(叶尔绍夫)教授生前组织全教研室的教授、副教授高级研究员、研究员们几十人并邀请俄罗斯冻土学界一些著名学者共同撰写的六卷冻土学巨著。

第一册 冻土学的地球物理和化学基础;

第二册 成岩冻土学(冷生岩石学);

第三册 区域冻土学和历史冻土学;

第四册 动力冻土学;

第五册 工程冻土学;

第六册 冻土预报和冻土带的生态问题。

这部著作汇集了当代冻土学各方面的基础理论和冻土区冻土工程的建设经验,是目前国际冻土学界唯一的一部这样的著作。这六册《冻土学原理》构成了冻土学的完整体系。但各册又可相对独立构成冻土学的分支学科。

这部著作可以作为我国冻土科研和在冻土区从事生态环境及冻土工程技术人员的重要参考资料之一,亦是年轻的冻土科研人员和博士生、硕士生的良好教材。

《冻土学原理》中文本的译校工作是在国家冻土工程重点实验室和中国科学院寒区旱区环境和工程研究所冻土与寒区工程研究室的领导马巍和吴青柏研究员的支持下邀请童伯良、刘经仁、张长庆、武筱龄四位本研究室退休人员完成的。

这套《冻土学原理》的俄语原著是 Э. Д. Ершов 教授及其他作者赠送给童伯良研究员的礼物。当时此书在俄罗斯书店早已售完。在得知我们研究室有意把此著作译

成中文出版时,Э. Д. Ершов 教授作为此著作的主编和地冰教研室主任当即欣然同意并无偿提供这部著作的中文版权,答应今后继续提供当时尚在编写的第六册原著。他只要求我们把这部著作的中文本送十套给地冰教研室,供在莫斯科大学学习的中国留学生使用。

可见这部《冻土学原理》中文本的出版是中俄两国冻土学界源自 20 世纪 50 年代延续至今的学术交流和友谊的见证之一。

童伯良

2014 年 10 月 21 日

原版序

到目前为止,已经有一系列关于冻土学的综述性著作。例如,1940年 М. И. Сумгиным、С. П. Качуриным、Н. Н. Толстихиным 和 В. Ф. Тумелем 编写的《普通冻土学》一书,在建立冻土的学科中起了重要作用。1959年冻土研究所出版了两卷本的《冻土学原理》著作集(П. Ф. Швецов、Б. Н. Достовалов 和 Н. И. Салтыков 主编),总结了普通冻土学和工程冻土学领域的理论研究成果。1967年在 В. А. Кудрявцев 领导下首次出版了《普通冻土学》教科书。也就是在这一时期发表了相当多的关于冻土学具体问题或某些方面的重要专著。所有这些著作在建立冻土学理论上发挥了巨大作用。然而这早已成为图书馆馆藏珍品了。由于近30年冻土学的理论基础和实践(工程)基础研究取得的巨大成就,冻土学的许多分支学科需要进行重要的增补。

本《冻土学原理》多卷书是一部系统论述多年冻土区学说的著作。多年冻土区占据地球所有陆地面积的25%以上,并约占俄罗斯国土的65%。本著作的作者面临如下的任务:要从自然历史方面和多年冻土区的国民经济发展出发,在总结业已建立的经典理论概念的基础上以及总结关于冻土和冻土地质过程、现象的形成与发育规律的最新资料的基础上,展示冻土学及其各分支学科和基本学术方向的现代发展水平。

冻土学是地质旋回的自然历史学科,研究冻土层及其中的冰、它们的成分、冷生结构、性质、冻土地质过程和现象形成与发育的时空规律。几百米厚(在高山地区可达1500 m以上)的冻结层构成了岩石圈的冻结带,其特征是负温(在深度10~20 m处为 -15°C)和包含大大小小的冰包体或冰晶。这没有什么可奇怪的,В. И. Вернадский 早就认为:许多具有极大科学意义和实践意义问题的解答恰恰与地表较深处的冷却界

线有关。

冻土层不是偶然的,而是有规律的、自然历史决定的生成物,以严格定义的、唯冻土层所有的现代和过去的发生(成因)、存在、发育和分布的规律为其特征。例如,地球上的实际资料能够肯定从早元古代(21 亿~25 亿年前)开始,在美洲、非洲、欧洲、亚洲、澳洲和南极洲大陆各地就存在过冻土和冰。若走出地球,则可发现太阳系大部分行星和整个宇宙的固态天体都应该是冷生体,即应该发育冻土。换言之,冻土学是更大的学科——行星冷圈学的一部分。

实质上,冻土学应该全面地、广泛地研究性质上新的、处于冻结状态的岩石的形成和发育的各方面。因而此学科已经形成的结构理应是地质学结构的缩小模型。决定冻土学的具体任务、学术和实践意义的冻土学组成部分是动力冻土学、成岩冻土学、区域和历史冻土学、工程冻土学(见图)。从这种结构可看到冻土学与地质旋回的各门学科、与各基础学科(物理学、化学、数学、力学)以及与地理学和生物学的许多学科(气候学、古地理学、地植物学、土壤学等)都有着那么重要的联系。

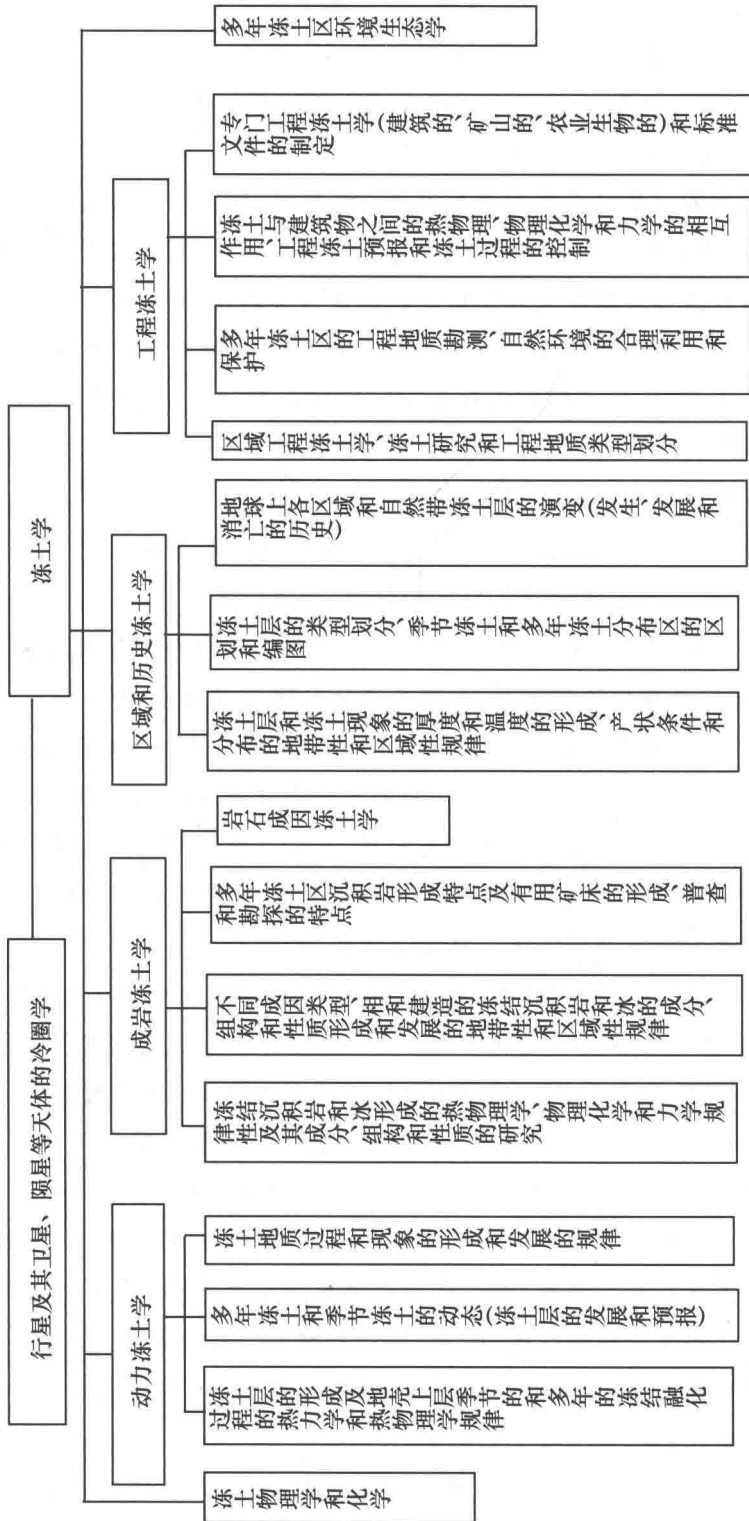
动力冻土学 研究在季节冻土层和多年冻土层发生和发展中起决定作用的冻结和融化、冷却和变暖的过程。研究正冻土、已冻土和正融土中发生的这些过程和其他过程,从能量的观点来看,实质上是提出了研究冻土发育的热力学方法。研究冻土层形成规律性的热力学和热物理学原理建立在研究“大气圈—岩石圈”系统中的热量交换、辐射热平衡和水热平衡、岩石中的温度状况和水分的相变以及地壳上层热过程的基础之上。当岩石的冻结和融化过程的热量方面与产生这些过程的环境中的地质地理条件紧密联系时就有可能研究多年冻土和季节冻土在分布面积和深度上随时间变化的动态(恢复形成和发育历史或预报将来的变化)。

动力冻土学的另一重要部分是研究冻土地质过程的热物理、物理化学和力学本质、形成和发展的规律性及其预报。冻土地质过程的结果产生所谓的自然地质现象,即诸如寒冻裂缝、地面冰和地下冰、冻胀丘、热融丘、融冻泥流、热侵蚀沟、冰锥等等这样的特殊冻土地形和新的地质体。

成岩冻土学(冷生岩石学) 根据多年冻土区发育于沉积岩中及其分阶段改造过程中的化学、物理化学、物理力学作用,揭示冻结沉积岩和冰的分散性、化学—矿物成分、结构—构造特点和组构形成的一般规律和局部规律。

虽然冻结沉积岩的成分、组构和性质与其冻结方式和条件以及沉积和构造形成的特点和速度紧密相关,但成岩冻土学赋予不同成因冻土层的研究以特殊的意义。此时,多年冻土区沉积岩形成过程及其结果是那么的特殊,以至于最近被划分为独立的岩石成因类型——冷生类型,这是最年轻的,仅在元古代才最终形成的岩石成因类型,越接近于现代,这种岩石成因类型的意义就越大。

冻土学的结构和学术方向



区域和历史冻土学 研究季节冻土层和多年冻土层的形成和发展,它们的分布、产状条件和温度、冻土层组构和厚度,以及冻土地质过程和现象的地带性与区域性规律。在此基础上,按照它们的成分、冷生组构、成因、年代、热量交换条件划分冻土类型,并对多年冻土发育区进行区划和编图。这一冻土学分支学科的重要学术方向是研究整个地球、各区域、各大陆冻土发生和发展的历史。

工程冻土学 是冻土学非常实用的分支学科,研究多年冻土区各种工程建筑物的设计、施工和营运的工程地质保障,为存在季节冻土和多年冻土的地区经济开发提供选择最可靠和最经济的方式的依据。此时任何具体的、特定形式的工程地质勘测都是在研究区域工程冻土学的基础上进行的。根据工程地质勘测的结果编制不同建筑类型的工程地质图,然后根据定性和定量研究冻土与建筑物之间相互作用的结果,对工程项目施工和营运期内地基和基础的性状做具体工程冻土预报。当预报情况不佳时,要采取有目的地改变(改造)冻土环境(土的温度、成分、含冰量、冷生组构和性质)及冻土工程地质过程和现象的办法,即设计控制冻土过程的措施。

最后,在研究冻土学的现代发展趋势时,必然会看到,在冻土学的基础上有效地利用关于地球冻土学说的知识和规律的一门更大的学科——**行星冷圈学**,已经开始形成:火星冷圈学正在快速发展着,月球冷圈学原理正在建立,木星及其卫星的冷圈学资料正在积累之中,等等。换言之,可以说冻土学将发展成行星冷圈学或宇宙冷圈学。

除上述四个分支学科之外(每一分支学科都理应单独成册予以研究),冻土学中一个重要的课题已经形成并得到了长足发展,即从分子运动和热力学的观点研究自然界及正冻土、已冻土、正融土物理化学和力学过程的规律性,已成为冻土学自身的任务。这个课题一般被简单地称为冻土物理学和化学,是一门中间学科,成为研究自然(地质地理)环境中冻土性状的理论基础。其实质在于:冻土是一个复杂的(多组分、多相、多孔隙、多分散性)、非常动态的物理化学系统,它包括处于平衡状态并能互相转换的三相水(未冻水、冰、水汽)。因此,冻土的性状在很大程度上取决于这种物理化学土系统形成(冻结)、进一步存在(负温下)和发展(融化或冻结—融化循环)进程中发育的热力学、热量物质交换、化学、物理化学、力学和结构—构造形成等过程。不了解上述过程不仅不能熟练地解释冻土层和冻土的发育史、它们的形成和分布条件、冻土地质过程和现象的形成和发展特点,而且也不能随着国土的经济开发而有科学依据地提出预报它们的变化和有目的地改造(控制)它们的建议。显而易见,冻土物理学和化学是冻土学的基本学术问题,是动力冻土学、成岩冻土学、区域和历史冻土学、工程冻土学的重要理论基础,因而,应单独予以研究。

随着多年冻土区经济开发的速度越来越快,自然环境的人为荷载是那么的沉重,使得现有的冻土生态系统业已建立的准平衡状态遭到剧烈破坏。多年冻土区在生态

方面与许多早就存在的观念不同,是最为脆弱的,其景观对人为影响高度敏感,并且景观的恢复又极其缓慢,更何况常常是不可逆的。正因为如此,多年冻土区各地(西西伯利亚、亚马尔半岛、中雅库特、诺里尔斯克、布拉茨克、南雅库特等庞大的地区生产综合体,贝加尔-阿穆尔铁路干线、东北地区的砂矿采掘区等)的人为破坏的后果在许多情况下是不可预测的和难以控制的,这就需要在全国范围内不可推迟地解决最复杂的生态问题。因此,近年来冻土学还产生了一个具有中间学科性质的基础学科课题——**多年冻土区的环境生态学**。

《冻土学原理》是由我国各部委、各机构、各部门的资深冻土学专家集体编写的:莫斯科大学、俄罗斯建设部建筑工程勘测生产和科研所、全俄国家建设委员会建筑勘测科学与生产联合公司、全俄水文地质和工程地质研究所、运输建筑工程研究所、俄罗斯科学院西伯利亚分院冻土研究所、全俄天然气科学研究所、保加利亚科学院泥炭研究所等。莫斯科大学地质系冻土教研室编写了本书的科学方法手册。

目 录

第一章 水和冰的物理学	1
§ 1.1 水和冰的热力学和分子物理学	1
§ 1.2 冰晶形成的机制和动力学	
..... (Э. Д. Ершов, И. А. Комаров, Е. М. Чувилин)	5
§ 1.3 冰的变质作用	13
§ 1.4 天然气水合物的形成 ... (Э. Д. Ершов, Е. М. Чувилин, В. С. Якушев)	16
第二章 关于冻土相变的热力学和分子动力学观点	25
§ 2.1 岩石组分和相之间的相互作用	25
§ 2.2 土中水的热力学	34
§ 2.3 细分散性土中的水分相变	41
§ 2.4 冻土中的化学反应	47
第三章 岩土中热量和物质的运输	52
§ 3.1 冻土和未冻土中热量和物质的运输	
..... (Э. Д. Ершов, С. Н. Булдович)	52
§ 3.2 正冻(融)土中的热质运输	60
§ 3.3 关于岩土冻结(融化)问题的提法	64

第四章 处于各种外作用场中的冻土物理化学过程	78
§ 4.1 温度梯度作用下冻土中的过程	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, А. В. Брушков)	78
§ 4.2 冻土中由应力梯度引起的过程	(Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко,
В. Д. Ершов, В. Г. Чеверев, Ю. В. Кулешов, А. В. Брушков)	85
§ 4.3 冻土中由水汽压力梯度引起的过程	
..... (Э. Д. Ершов, И. А. Комаров, Э. З. Кучуков)	93
§ 4.4 冻土中由其他外力作用引起的过程	(Э. Д. Ершов, А. В. Брушков,
Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, Л. В. Шевченко, В. В. Кондаков,	
Г. В. Николаева, Е. М. Чувилин)	100
第五章 冻土与盐溶液相互作用的过程	112
§ 5.1 发育物理化学过程和物质交换过程的动力	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, Е. М. Чувилин)	112
§ 5.2 不同外部热力条件下不同成分土中物理化学和物质交换过程的规律	
..... (Ю. П. Лебеденко, Е. М. Чувилин)	116
§ 5.3 盐溶液作用下冻土中物理力学过程的特点	
..... (Ю. П. Лебеденко, Е. М. Чувилин)	122
§ 5.4 冻土与重金属盐溶液相互作用时所发生的过程	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, Е. М. Чувилин,	
Н. А. Бенедиктова)	130
第六章 正冻土和正融土的热量、物质输运过程	138
§ 6.1 正冻土的水分迁移性质和机制	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев)	138
§ 6.2 各种热力条件下不同成分和组构的正冻土中的水分迁移	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, В. В. Кондаков)	142
§ 6.3 正冻土的离子迁移	
..... (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, Н. С. Налетова)	145

§ 6.4 正融土水分迁移的特点 … (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, В. З. Хилимонюк)	152
第七章 正冻土和正融土的物理化学过程和结构形成过程 ……………	156
§ 7.1 正冻土(正融土)无水分迁移时的过程 …………… …………… (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, О. М. Язынин)	156
§ 7.2 正冻土(正融土)存在水分迁移时的过程 …………… …………… (Э. Д. Ершов, Ю. П. Лебеденко, В. В. Кондаков, Е. М. Чувилин, О. М. Язынин, А. А. Мурашко)	163
§ 7.3 正冻未固结土中的过程 ……………	170
§ 7.4 冻融循环中土的物理化学过程和结构形成过程 …………… …………… (Э. Д. Ершов, П. С. Дацько, Е. М. Чувилин, Э. З. Кучуков, Ю. П. Акимов)	181
第八章 正冻土和正融土的物理力学过程 ……………	193
§ 8.1 正冻土和正融土的变形和应力 …………… (Э. Д. Ершов, А. В. Брушков, Ю. П. Лебеденко, В. Г. Чеверев, Л. В. Шевченко)	193
§ 8.2 正冻土的冻胀 …………… …………… (Э. Д. Ершов, А. В. Брушков, Ю. П. Лебеденко, В. С. Петров)	204
§ 8.3 正融土的沉降 …………… (Э. Д. Ершов, А. В. Брушков, Р. Г. Кальбергенов, С. В. Топеха, Л. В. Чистотинов, В. З. Хилимонюк)	218
§ 8.4 由外压力作用产生的冻土过程 …………… (Э. Д. Ершов, Л. Г. Роман, Ю. В. Кулешов, О. А. Кондакова, Л. В. Шевченко, В. Г. Чеверев)	224
参考文献 ……………	241

第一章 水和冰的物理学

§ 1.1 水和冰的热力学和分子物理学

到目前为止,水(不仅是结合水而且还有自由水)的结构尚未充分研究清楚,尽管提出了大量有争议的模型。根据实验资料,水分子中 H 核和 O 核形成等腰三角形,两个 H 质子在三角形底上, O 核位于三角形顶点(图 1.1)。水汽分子中 O—H 和 H—H 的间距分别为 $0.96\text{\AA}$ 和 $1.54\text{\AA}$,而 HOH 角为 104.5° 。液相水与固相水之间的相互作用以及温度的变化使得 O—H 间距和 HOH 角偏离单个分子所固有的值。例如,冰中连接 HOH 的角约为 109.5° ,而 O—H 的间距达到 $1.01\text{\AA}$ 。水分子中核周围的 10 个电子有 2 个围绕着 O 核运动,而其余 8 个电子的状况可以用成对地沿着 4 个扁长的椭圆形轨道的运动来描述。其中 2 个轴沿着 O—H 键,另两个轴位于通过 O 核的、垂直 HOH 面的平面上。这 4 个轨道的轴向以水分子的几何中心为中心的四面体顶点集中。处于 2 个轨道内的质子保证分子正电荷的两极,而负电荷的两极与沿另两轨道运动的形成孤立电偶的电子相连接。

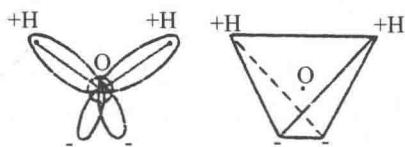


图 1.1 H_2O 分子模型

长期以来一直认为水是分子无序热运动的非晶质物体的典型代表。然而,严格的理论和实验研究结果表明,水分子在最接近的四周形成四面体,重复着水分子的四面体形的结构。此时水和冰的结构中分子间形成氢键。处于近配位区的分子平均数,即 H_2O 分子的配位数,在冰结构中为 4,而在水中要增加一些(在 $1.5 \sim 4^\circ\text{C}$ 时达 4.4),这本身说明了水的密度与冰相比较在增大。与固体不同的是,水分子的空间分布不是严格固定的,水分子是极为活跃的。根据现代的概念,液体中和晶体中分子和缔合子的热运动由围绕着临时平衡位置的波动以及从一个位置到另一个位置的跃移组成。跃移(平移)是粒子的自扩散。要完成跃移突变就必须使粒子的运动能大于结合能 E_{cb} ,这常被称为突变激活动能。

例如,计算数据表明, 25°C 温度时每个水分子每秒约完成 6×10^8 次跃移。彼此被分子停留在平衡中心附近的时间所分隔的跃移时间为 $1.7 \times 10^{-9}\text{s}$ 。停留于平衡位置

期间(两次跃移之间)的水分子约完成 1000 次波动。总的来说,每秒分子的跃移次数或跃移频率(ω)可用下式表示:

$$\omega = \omega_0 \exp(-E_{cb}/RT) \quad (1.1)$$

式中, ω_0 ——与粒子在平衡位置附近的波动频率有关的系数; R ——气体常数; T ——绝对温度。

粒子在一个平衡中心附近波动的平均时间是 ω 的倒数,即 $\tau = 1/\omega$ 。除了液体和气体单个分子的上述运动形式之外,还发生由周围粒子的撞击造成的分子群移。这种分子缔合产生的布朗运动叠加在单个水分子的平移之上。

上述关于平移的概念涉及的是自由水,不考虑离子水合现象,即水溶液中溶质离子与水分子之间的相互作用,以及水分子被土粒矿物表面有效中心所束缚的效应。而这些情况下水分子的结合能与自由水中分子的活化能(E_{cb})相比较,一方面增大了水分子被离子所束缚的能量值(E_{cb}^n),另一方面也都增大了土粒矿物表面的结合能量(E_{cb}^n)。因此结合水水平跃移频率应有所减小,并可按下式予以确定:

$$\omega = \omega_0 \exp[-(E_{cb}' + E_{cb}^n + E_{cb}^n)/RT] \quad (1.2)$$

当跃移的分子或水汽缔合子以及水被周围的水分子碰撞或吸引时,它们就能发生堆积和凝聚。跃移缔合子和水分子的这种捕捉效应(化合能力)只有在相互作用的分子的单位自由表面能 ΣE_s^m 大于跃移分子的运动能时($\Sigma E_s^m > E_k$)才可能发生。当水汽或水中跃移分子的这种合并过程占优势时,则应发生水汽变成水和水变成冰这样的相变。

目前还没有一个被普遍接受的自由水模型。在 Дрост - Хансен(1967)、Каванау(1964)、Самойлов(1967)等人的著作中可以找到有关这一问题的评论。可将现有的水结构模型分成两个基本组,一组模型将水视为无结构液体(均质的中和模型),另一组模型假设水具有结构要素,可视为至少由两种状态组成的溶液,Франк(1963)将此模型称为“混合物模型”。第一组假设液态水模型不存在任何有代表性的结构。Бернал 和 Фаулер(1933)、Попл(1951)等人对假定所做的不同修正,在许多场合能定性描述一系列性质。但由于定量估算结果不令人满意,因而很难予以应用。看来,结构要素仍然是液态水所固有的性质。第二组模型的假定可相对划分为三类(Дрост - Хансен,1967):(1) 具有冰的破碎晶格(与单体处于平衡状态的冰状结构单位);(2) 与单体处于平衡状态的原子团;(3) 建立在包合物概念(也与单体处于平衡状态)的基础上。无论哪一类假定都意味着至少存在两种形式的水,就是形成若干结构单位综合体的自由水和由单分子组成的黏滞水。上述模型都假定存在某些结构要素,但不一定将结构要素描述为充填空间的稳定的、长寿命的、特殊的晶体构形,不如说它们具备“颤动的一群”的性质。虽然根据将水视为结构上类似于冰结构的微晶混合物进行的