

# СТРУКТУРА ЖИДКОЙ ВОДЫ. НОВЫЙ ПОДХОД

**Предложены новые критерии образования молекулами воды водородных связей. В образовании водородной связи может принимать участие только одна гидроксильная группа молекулы воды. При связывании протона второй гидроксильной группы и образовании водородной связи в молекуле воды должно произойти перераспределение электронной плотности и в результате должна разрушиться водородная связь у первого гидроксила. Именно наличием несвязанных «свободных» гидроксильных групп можно объяснить причину очень высокой растворяющей способности воды по отношению к другим веществам. Поэтому молекула воды может одновременно участвовать не более чем в двух водородных связях. Только в случае наличия в воде ионов может быть образовано три водородных связи. Исходя из предложенных критериев с помощью квантово-химических расчетов показано, что в жидкой воде при нормальном атмосферном давлении и при температуре от 0 °С до 100 °С возможно существование только трех видов ассоциатов: гексамеры, тетрамеры и тримеры. Взаимными переходами между ними, происходящими при изменении температуры, объясняются аномальные свойства воды.**

## Введение

**Р**еальная структура жидкой воды, т.е. расположение ее молекул друг относительно друга в пространстве, несмотря на столетие непрерывных исследований и многочисленность предложенных гипотез, до сих пор остается непознанной.

Вода – это единственная жидкость, которая в соответствии с общепринятыми представлениями о химическом строении вещества не должна быть жидкостью при обычных условиях [1]. Ее очень близкие и при этом значительно более «тяжелые» аналоги –  $H_2S$ ,  $H_2Se$ ,  $H_2Te$  при комнатной температуре являются газами. То, что вода при 0-100 °С является жидкостью – это аномалия. Только введение представления о водородных связях, в которых могут участвовать молекулы воды, смогло объяснить данное явление [2, 3].

Но целый ряд других, не менее важных и давно установленных для воды фактов до

**Д.Д. Гриншпан\***,  
доктор химических наук, профессор  
Учреждение  
Белорусского государственного университета  
«Научно-исследовательский институт физико-химических проблем» (НИИ ФХП БГУ),  
зав. лаб. растворов целлюлозы и продуктов их переработки



настоящего времени даже гипотетически не объяснен. Например, почему плотность воды с понижением температуры от 4 °С до 0 °С не растет, а падает? Почему плавление льда при атмосферном давлении приводит не к увеличению, а к уменьшению объема (на 9 %)? Почему при нагревании воды до 37 °С ее удельная теплоемкость в отличие от других веществ не растет, а снижается? Почему с увеличением давления при температуре ниже 30 °С вязкость воды не увеличивается, а уменьшается? Почему при одной и той же температуре система вода-вещество, например, в случае сверхконцентрированного раствора гидроксида натрия  $NaOH:H_2O$  (1:2 мол.) является жидкостью, а в другом – при значительно большем избытке воды – твердым веществом (кристаллогидрат  $Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$  (1:10 мол.)?) Сегодня, несмотря на существование огромного количества физических методов исследования, для изучения структуры воды применима лишь очень малая доля этих методов, а именно ИК, КР и ПМР-спектроскопия, атомно-силовая (АСМ) и сканирующая туннельная микроскопия (СТМ),

\* Адрес для корреспонденции: [grinshpan@bsu.by](mailto:grinshpan@bsu.by)

имеющих, к сожалению, ограниченные исследовательские возможности.

Поэтому в последнее время для решения тех же задач все чаще применяют квантово-химические методы исследования [4-7]. На сегодняшний день существует множество примеров расчетов, посвященных структуре воды. Как правило, в них подчеркивается возможность образования водных кластеров с огромным количеством «трехмерносвязанной» воды, что, на наш взгляд, не может соответствовать реальному положению вещей, так как вода является отличным растворителем для очень многих ионогенных, полярных и даже неполярных веществ, что невозможно ожидать от воды, превращенной в «сшитый полимер». Ведь образование «трехмерных» водородных связей, приписываемых воде абсолютным большинством исследователей, должно приводить только к резкому снижению активности ее молекул и превращению ее в «нерастворитель».

Существующие многочисленные гипотезы, пытающиеся объяснить наблюдаемые аномалии воды, к сожалению, противоречат не только друг другу, но и конкретным экспериментальным данным. Например, общепринятая гипотеза об ажурном строении воды, когда в полостях каркасных структур размещаются свободные молекулы воды, не подтверждается ИК и КР спектрами жидкой воды. В этих спектрах полностью отсутствуют полосы поглощения ( $> 3650 \text{ см}^{-1}$ ), что однозначно указывает на отсутствие в системе свободных молекул воды. Также ничего общего с реальностью, по нашему мнению, не имеют структуры, где предусматривается

**А.В. Потоцкий,**

студент  
химического  
факультета БГУ

**А.Н. Гончар,**

младший научный  
сотрудник НИИ  
ФХП БГУ,  
магистрант  
каф. химии ВМС БГУ

одновременное упорядочение огромного количества молекул воды. Квантово-химические расчеты упорядоченных структур, состоящих из десятков, сотен и даже тысяч молекул воды типа додекаэдров, икосаэдров и т.п., по нашему мнению, не имеют физического смысла. Мы считаем, что статистическая вероятность образования упорядоченных структур даже с шестью молекулами воды при постоянном тепловом движении чрезвычайно мала и может быть реализована только при температурах, близких к  $0 \text{ }^\circ\text{C}$ . На сегодня нет и экспериментальных подтверждений наличия в жидкой воде льдоподобных тетраэдров. Они были зафиксированы лишь в твердой фазе. Естественно возникает вопрос, почему они должны сохраняться при переходе в жидкую фазу? Ведь до сих пор неизвестен ни один случай сохранения кристаллической решетки вещества при его растворении и образовании истинных растворов.

Для справки: еще в 1984 г. в статье [8] Г.Г. Маленкова были просуммированы практически все представления о строении жидкой воды, имеющиеся на тот момент времени. С тех пор получено очень много новых фактов, но принципиальных изменений в представлениях о строении жидкой воды до сих пор не произошло (см. статью [9] того же автора). По-прежнему считается, что в воде молекулы связаны водородными связями, образующими непрерывную трехмерную сетку. Такой взгляд на воду впервые был предложен Берналом и Фаулером еще в 1933 г [10, 11]. К сожалению, эта, как и существовавшая до нее гидродная модель, не может



объяснить известные аномалии воды – немонотонные зависимости многих свойств от температуры (объем, плотность, теплоемкость, сжимаемость) и от давления (вязкость, коэффициент диффузии) и т.п. Попытка модернизировать эту гипотезу путем внесения в модель элемента двухструктурности – представления о том, что в воде сосуществуют более плотная (кварцеподобная) и менее плотная (тридимитоподобная) структуры – также не дала положительных результатов. Предложенный О.Я. Самойловым [12] вариант наличия в воде двух «микрофаз», в соответствии с которым в воде сохраняется льдоподобная сетка водородных связей и ее полости частично заполнены мономерными молекулами, не подтвердился реальным экспериментом. По данным ИК и КР спектроскопии таких молекул в интервале температур от 0 до 100 °С нет.

В случае воды нужно научиться, имея списки координат атомов, полученных в численном эксперименте, определять, какие молекулы соединены водородными связями. До сих пор не существует единого мнения, как это делать. В работах по моделированию воды до нашей работы использовали три типа критериев: геометрический, энергетический и динамический. При использовании геометрического критерия предполагается, что между молекулами существует водородная связь, если расстояние между атомами кислорода  $R_{OO}$  и/или расстояние между атомом кислорода одной молекулы и атомом водорода другой молекулы  $R_{OH}$  меньше некоторых критических значений  $R_{OO}^{max}$  и  $R_{OH}^{max}$ . Энергетический критерий предполагает, что молекулы соединены водородной связью, если парная энергия взаимодействия ниже пороговой величины  $E^{max}$ . Есть еще и динамический критерий, который дает ответ на вопрос о периоде времени, в течение которого для данной пары молекул выполняется геометрический критерий водородной связи. По нашему мнению, этих критериев оценки образования водородной связи (или необра-



#### Ключевые слова:

структура жидкой воды, физико-химические свойства воды, водные ассоциаты, квантово-химическая модель воды

зования) недостаточно и поэтому мы ввели свои дополнительные критерии оценки возможности реализации тех или иных водных структур и предложили ряд совершенно новых требований по их отбору [13, 14]. Для подтверждения высказанных гипотез и получения корректных результатов на всех стадиях эксперимента данные своих расчетов мы сопоставляли с реально установленными для воды экспериментальными величинами.

Сначала нами были рассчитаны возможные структуры водных ассоциатов  $(H_2O)_n$ , отличающихся количеством и порядком расположения молекул воды ( $n = 1-8$ , табл. 1). Для оптимизации геометрии и расчета полной энергии водных кластеров использовался «супермолекулярный» подход с применением программы *HyperChem 8.0 Professional* и HF/6-31G(d,p) уровня теории [15].

При проведении расчетов был использован метод Хартри-Фока (HF) и базисный набор 6-31G с добавлением поляризационных функций р-типа к атомам водорода и функций d-типа к атомам элементов второго периода, который свидетельствовал, что:

- ◆ каждая внутренняя атомная орбиталь описывается одной базисной функцией – контрактированной гауссовской функцией (*contracted gauss function* (CGF)), построенной из шести примитивных гауссовских функций;
- ◆ каждая валентная атомная орбиталь описывается двумя базисными функциями –  $\phi'$  (внутренней) и  $\phi''$  (внешней). Первая  $\phi'$  – CGF, построенная из трех примитивных гауссовских функций, вторая  $\phi''$  – CGF, построенная из одной примитивной гауссовской функции.

Основные приближения, используемые в квантово-химических пакетах программ при решении уравнения Шрёдингера:

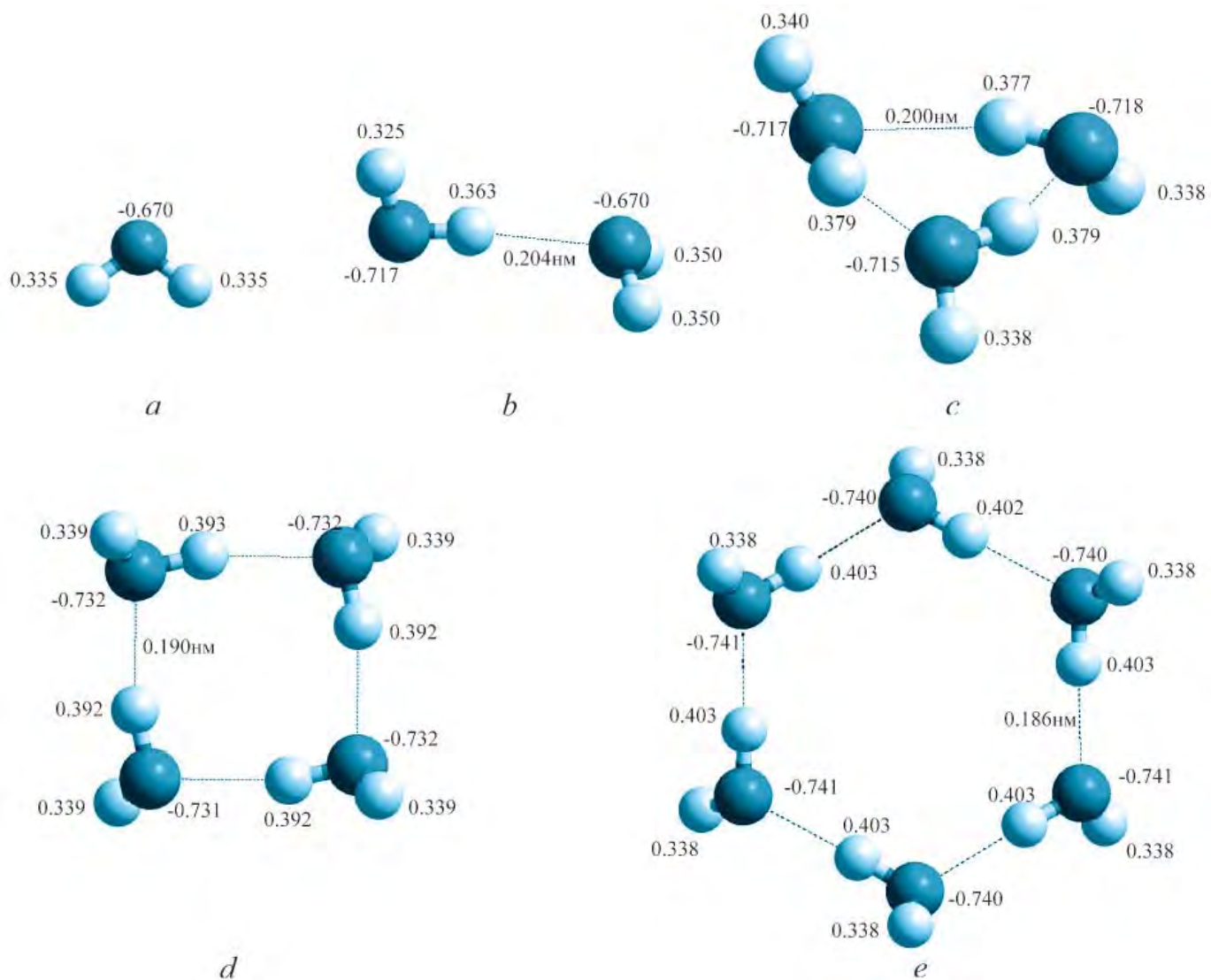
- ◆ приближение Борна-Оппенгеймера;
- ◆ приближение невзаимодействующих электронов;
- ◆ приближение линейной комбинации атомных орбиталей и пр.

Для каждой структуры были получены данные о длине водородных связей, зарядах на атомах и величинах полной энергии.

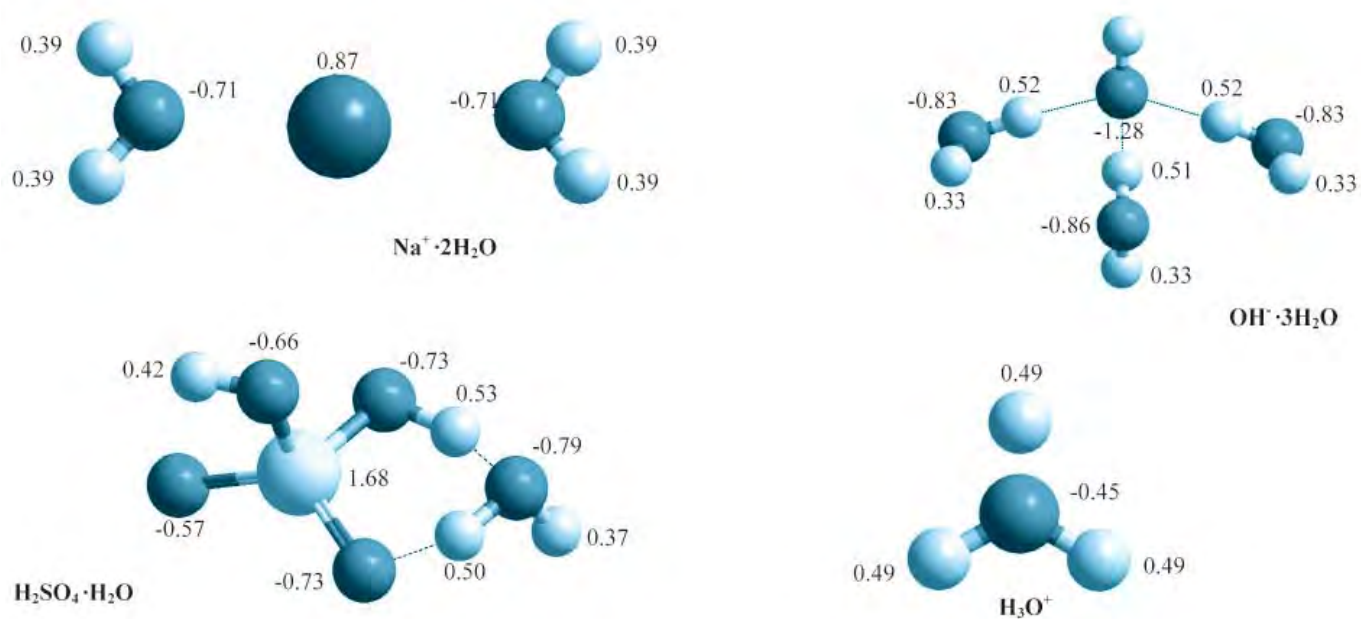
Расчет энергии, приходящейся на одну молекулу воды, проводили по формуле:

$$E_n = E(H_2O)_n/n$$

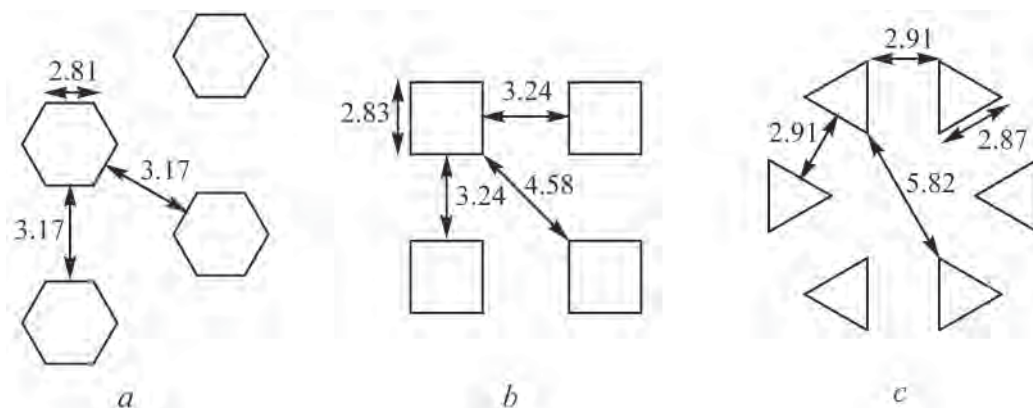
где  $n$  – число молекул воды в ассоциате,  $E(H_2O)_n$  – полная энергия ассоциата (табл. 1). Из всех исследованных нами структур (всего их было рассчитано более 20) наиболее вероятными как с точки зрения известных экспе-



**Рис. 1.** Наиболее вероятные структуры водных ассоциатов в газовой фазе (а – мономер; b – димер) и в жидкой фазе (с – тример; d – тетрамер; e – гексамер).



**Рис. 2.** Гидраты ионов и молекул.



**Рис. 3.** Модели наиболее вероятных упаковок молекул воды а) при 0 °С; б) при 4 °С; в) при 4–100 °С.

риментальных данных, так и с точки зрения расчета полной энергии в газовой фазе ( $>100\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) являются мономеры и димеры воды, а в жидкой фазе в интервале температур от 100 до 0 °С – три циклические структуры – тримеры, тетрамеры и гексамеры, содержащие 3, 4 и 6 молекул воды соответственно. Для всех этих структур нами были определены их геометрические характеристики и энергии связей, а также возможные варианты их упаковки в объеме жидкости (рис. 1-3, табл. 1).

При объяснении полученных результатов мы исходили из следующих признаков образования водородных связей:

1. Образование водородной связи имеет место только тогда, когда при взаимодействии двух и более молекул воды на атомах водорода и кислорода молекул воды происходит закономерное изменение электронной плотности. Это изменение должно происходить таким образом, чтобы положительный заряд на атоме водорода, непосредственно участвующего в образовании водородной

**Таблица 1**

Ab initio расчеты водных ассоциатов  $(\text{H}_2\text{O})_n$

Кол-во мол., n	$E(\text{H}_2\text{O})_n$ , кДж/моль	$E(\text{H}_2\text{O})$ , кДж/моль	Структура	Кол-во мол., n	$E(\text{H}_2\text{O})_n$ , кДж/моль	$E(\text{H}_2\text{O})$ , кДж/моль	Структура
1	-199 599,98	-199 599,98		5	-998 157,88	-199 631,58	
2	-399 223,18	-199 611,59		6	-1 197 794,81	-199 632,47	
3	-598 871,61	-199 623,87		7	-1 397 424,62	-199 632,09	
4	-798 521,50	-199 630,38		8	-1 597 058,41	-199 632,30	

связи с атомом кислорода, всегда должен быть больше по величине, чем заряд у отдаленного «свободного» атома водорода той же молекулы. Это требование полностью соответствует общепринятому условию образования водородной связи.

2. В отличие от существующих на сегодняшний день представлений об образовании в воде трехмерной сетки водородных связей мы считаем, что это невозможно, так как при одновременном участии обоих гидроксильных групп одной молекулы в водородных связях не будет выполняться вышеназванное условие образования водородной связи. Поэтому второй «свободный» атом водорода не может участвовать в образовании водородной связи, так как при этом будет нарушено постулированное в первом пункте перераспределение электронной плотности. Если вероятность участия второго атома водорода в водородной связи по каким-либо причинам будет больше, чем первого, то это должно привести к разрыву водородной связи у первого атома. Поэтому нереально образование сложных структур с многочисленными водородными связями (тетраэдров, додекаэдров, икосаэдров, различных «этажерок» и т.д.), так как при их «строительстве» одновременно должны разрушаться ранее образовавшиеся водородные связи. Исходя из данного постулата, все остальные рассчитанные нами структуры, включая линейные образования зигзагообразной формы, пентамеры в виде тетраэдра или замкнутого цикла, гептамеры, октамеры и т.п. должны быть исключены из реально существующих в жидкой воде, так как не удовлетворяют выше названным требованиям – они имеют либо меньшую энергию образования, либо для них не соблюдается основное из названных выше условий образования водородных связей, когда одна из гидроксильных групп должна быть обязательно «свободной» и при этом, как и в «связанной» группе, должна иметь положительный заряд на атоме водорода больший, чем в мономерной молекуле воды.

3. По нашему мнению, одна молекула воды может участвовать в образовании только двух водородных связей (одна через атом кислорода, другая через атом водорода). Исключение возможно только для молекул воды, в которых есть структурирующие их ионы. Здесь большая вероятность возникновения трех водородных связей (двух связей через атом кислорода и одной через атом водорода). Такие ассоциаты могут существовать в растворах электролитов, ионы которых разрушают водородные связи между молекулами воды и ориентируют их на себя с помощью электростатических сил.



Например, при введении в систему катионов щелочных металлов происходит разрушение водородных связей между молекулами воды и выравнивание зарядов на атомах водорода, что является четким критерием прекращения существования водородной связи между молекулами воды (рис. 2). По-видимому, это происходит и при образовании твердых кристаллогидратов.

На основе анализа изменения величины энергии, приходящейся на одну молекулу воды, подтверждается известное мнение о том, что присоединение к иону каждой последующей молекулы воды становится все менее выгодным процессом. Энергия процесса в целом закономерно уменьшается. Компьютерное моделирование процесса гидратации протона подтвердило и другое известное мнение о том, что протон связывает молекулу воды, образуя ион гидроксония, в котором все три протона равноценны как по величине заряда, так и по длине связи. В случае введения в воду анионов, например  $\text{OH}^-$ , происходит увеличение степени смещения электронной плотности от «свободного протона» к «связанному». Аналогичные расчеты также показывают, что между молекулой воды и, например, сульфатной группой образуются очень сильные межмолекулярные взаимодействия. Это позволяет объяснить существование сверхпрочно связанных молекул воды в серной кислоте и невозможность их отрыва от кислоты при дистилляции.

4. Учитывая, что у воды есть несколько особых температур:  $0^\circ$ ,  $4^\circ$ ,  $37^\circ$  и  $100^\circ\text{C}$ , при которых наблюдаются либо экстремумы в изменении тех или иных физико-химических свойств, либо значительное отклонение этих свойств (температуры кипения, плотности, теплоемкости, вязкости и др.) от их закономерного изменения в ряду аналогов, например, халькогенидов, то логично было предположить, что все экспериментально фиксируемые для воды аномальные свойства обусловлены различием в зависимостях от температуры физических характеристик у кластеров, отличающихся друг от друга количеством участвующих в их образовании молекул воды.

Исходя из экспериментальных фактов и предложенных выше критериев, из рассмотрения возможных для жидкой воды структур надо исключить мономеры и димеры, так как они могут образовываться при нормальном атмосферном давлении только при температуре выше  $100^\circ\text{C}$ , когда вода переходит в газообразное состояние. Они могут быть и при более низких температурах, но в особых условиях, например, в составе твердых кристаллогидратов или в растворах электроли-

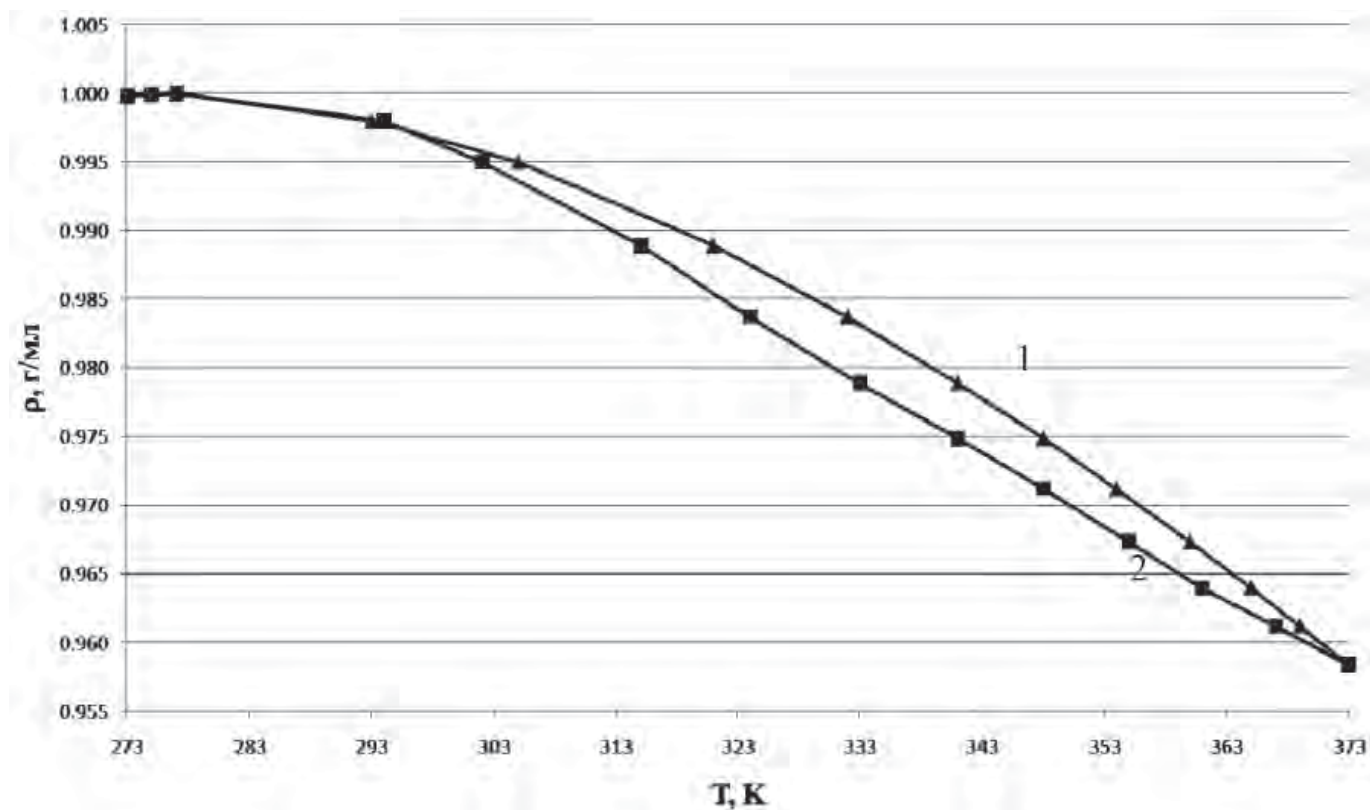
тов, ионы которых взаимодействуют с водой сильнее, чем молекулы воды друг с другом. По нашему мнению, при 0 °С наиболее вероятными являются гексамеры. При их расположении, как указано на *рис. 3а*, может быть обеспечена плотность воды, равная экспериментально определенной – 0,99984 г/см<sup>3</sup>. При нагревании до 4 °С гексамеры превращаются в тетрамеры, которые упакованы более плотно и поэтому вода имеет при 4 °С максимальную плотность – 1,00000 г/см<sup>3</sup>, а при 100 °С в жидкой воде присутствуют только тримеры, упакованные так, как это показано на *рис. 3с*. Плотность воды при этом составляет 0,95837 г/см<sup>3</sup>, что соответствует табличным данным.

Логично также предположить, что при промежуточных температурах в диапазоне от 0 до 100 °С жидкая вода представляет собой либо смесь гексамеров с тетрамерами, либо смесь тетрамеров с тримерами. Вполне реально допустить, что гексамеры могут существовать только в интервале от 0 до 4 °С, поскольку вероятность образования таких больших молекулярных ассоциатов с увеличением температуры должна резко уменьшаться. Поэтому можно предположить, что в интервале от 0 до 4 °С происходит переход гексамеров в тетрамеры, а в интервале от 4 до 100 °С – переход тетрамеров в тримеры. Именно присутствием в воде

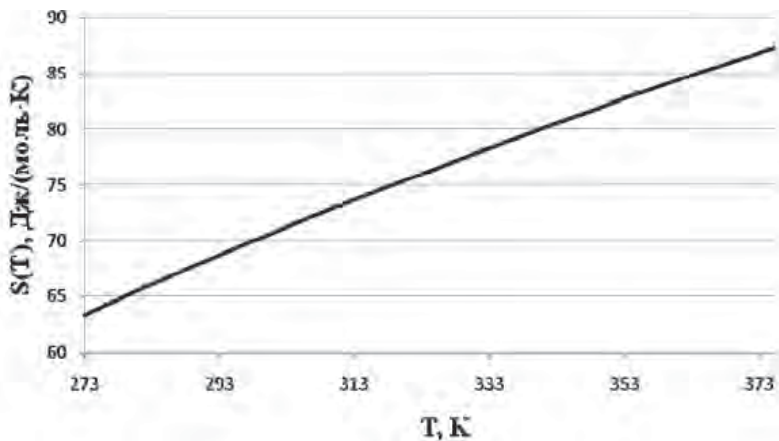


различных структур и их температурными переходами из одной в другую можно объяснить наличие у воды экстремальной зависимости удельной теплоемкости от температуры (до 37 °С). Экстремальная зависимость – это когда одновременно протекают два процесса: 1) переход тетрамеров в тримеры, имеющих, по-видимому, меньшую удельную теплоемкость, чем тетрамеры; 2) закономерное увеличение для любых структур удельной теплоемкости с повышением температуры. Это можно подтвердить следующим расчетом.

Зная экспериментальное значение плотности воды при конкретной температуре, можно определить объемную долю каждого из водных ассоциатов при той же температуре. Критерием правильности определения параметров являются близкие значения расчетной плотности и экспериментальной. Исходя из этой зависимости и предположения, что при 100 °С в жидкой воде существуют только тримеры, при 4 °С – тетрамеры, а при 0 °С – гексамеры нами были определены объемные доли различных структур в интервале температур от 0 до 100 °С. Затем на основании найденного соотношения была построена кривая зависимости плотности воды от температуры. Как видно из графика (*рис. 4*), наши данные хорошо согласуются с экспериментальными.



**Рис. 4.** Графики зависимости плотности воды от температуры: 1 – экспериментальный, 2 – расчетный.



**Рис. 5.** График зависимости энтропии жидкой воды от температуры.

Исходя из значений энтропии (рис. 5) при определенных температурах, можно определить термодинамическую вероятность существования ассоциатов по закону Больцмана

$$S = k \cdot \ln W$$

откуда

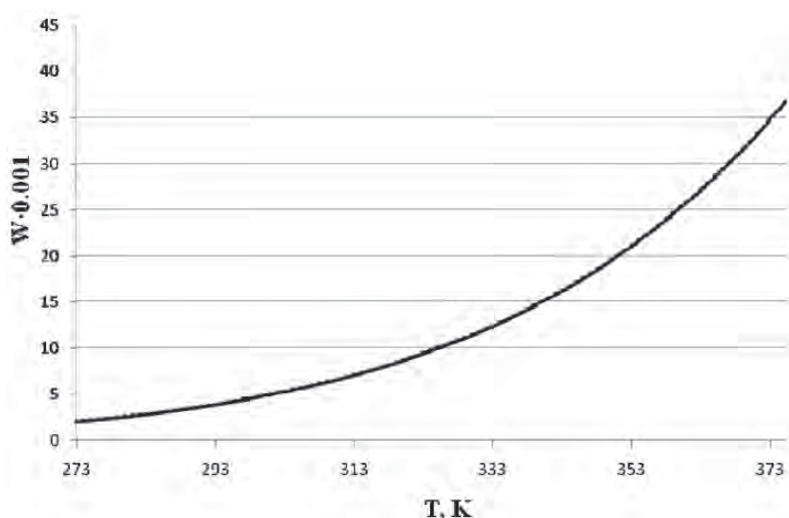
$$W = e^{\frac{S}{k}}$$

Для того, чтобы свободно оперировать величиной  $W$ , следует выразить энтропию не на 1 моль вещества, а на одну молекулу воды, тогда:

$$W = e^{\frac{S}{k \cdot N_a}}$$

График зависимости термодинамической вероятности существования системы от температуры представлен на рис. 6.

Предложенная модель позволяет рассчитать плотность для каждой структуры воды как объемно-аддитивное свойство. Средняя



**Рис. 6.** График зависимости термодинамической вероятности существования ассоциатов от температуры.

плотность смесей нескольких структурных упаковок может быть вычислена по правилу смешения, исходя из объемных долей водных молекулярных ассоциатов. Результаты, полученные в ходе проведения компьютерного моделирования, позволили установить расстояния между молекулами воды в водных ассоциатах. Кристаллоструктурный подход к расчету плотности упаковок молекул воды дал возможность определить параметры элементарной ячейки, а именно расстояния между молекулами внутри слоя и межслоевое расстояние. Для этого была использована зависимость плотности упаковки от объема соответствующей элементарной кристаллохимической ячейки.

Плотность вещества была рассчитана по известной формуле:

$$\rho = \frac{n \cdot M}{N_a \cdot V_{\text{эл.яч.}}}$$

где  $n$  – количество молекул воды в элементарной ячейке,  $M$  – молекулярная масса воды,  $N_a$  – число Авогадро,  $V_{\text{эл.яч.}}$  – объем элементарной ячейки.

Параметры упаковок водных ассоциатов, рассчитанные исходя из кристаллохимических представлений, приведены на рис. 3. Отметим, что данные результаты по расчету плотности полностью согласуются с соответствующими квантово-химическими расчетами (см. рис. 4).

Введение новых критериев оценки возможности или невозможности образования водородных связей, основанные на квантово-химических расчетах и их сопоставлении с известными экспериментальными данными, позволит в ближайшем будущем объяснить различную растворимость близких по химическому строению неорганических соединений, оценить величину степени их диссоциации на ионы или на ионные пары, рассчитать коэффициенты активности, определить растворяющую способность воды по отношению к веществам различной химической природы. Например, такое вещество, как бензол, может быть растворено в заметных количествах в воде только при повышенных температурах, когда появляются тримеры, т.к. в случае других кластеров воды вследствие их более плотной упаковки свободного пространства для бензола практически нет. В то же время неорганические ионы, особенно малых размеров, могут легко помещаться не только снаружи, но и внутри самих кластеров, например, в гексамерах. Поэтому и растворимость электролитов в воде значительно выше, чем бензола.



## Литература

1. Синюков В.В. Вода известная и неизвестная. М.: Знание, 1987. 176 с.
2. Jeffrey G.A. An Introduction to Hydrogen Bonding. NY: Oxford University Press, 1997. 320 p.
3. Эпштейн Л.М. Многоликая водородная связь / Л.М. Эпштейн, Е.С. Шубина // Природа, 2003. № 6. С. 127-133.
4. Maheshwary, N. et al. Structure and Stability of Water Clusters (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>, n = 8-20: An Ab Initio Investigation. J. Phys. Chem. A. 2001. V. 105, P. 10525-10537.
5. Anick D.J. Zero Point Energy of Polyhedral Water Clusters // J. Phys. Chem. A. 2005. V. 109, P. 5596-5601.
6. Xenides D. et al. Hydrogen bonding in liquid water: An ab initio QM/MM MD simulation study // J. Mol. Liq. 2006. V. 123. P. 61-67.
7. Su J.T. et al. Accurate Energies and Structures for Large Water Clusters Using the X3LYP Hybrid Density Functional // J. Phys. Chem. A. 2004. V. 108. P. 10518-10526.
8. Маленков Г.Г. Структура воды // Физическая химия. Современные проблемы / Под ред. Я.М. Колотыркина. М.: Химия, 1984. С. 41-76.
9. Маленков Г. Г. Структура и динамика жидкой воды // Журнал структурной химии. 2006. Т. 47. С. 5-35.
10. Bernal J.D. A Theory of Water and Ionic Solution, with Particular Reference to



Hydrogen and Hydroxyl Ions / Bernal J.D., Fowler, R.H. // J. Chem. Phys. 1933. V. 1. P. 515-548.

11. Бернал Дж. Структура воды ионных растворов / Бернал Дж., Фаулер Р. // Успехи физических наук, 1934. Т. 14. Вып. 5. С. 586-644

12. Самойлов О.Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. М: Изд-во АН СССР, 1957. 184 с

13. Гриншпан, Д.Д. Новое о структуре и методах очистки жидкой воды / Д.Д. Гриншпан // Вода, изменение климата и здоровье человека: Тезисы докладов Междунар. молодежн. форума, Минск, 25-26 ноября 2009 г./ Белорус. гос. ун-т; составители М.Г. Иванец, А.Н. Трифонова, И.М. Кимленко. Минск: Рэйплац, 2009. С. 11-16

14. Гриншпан, Д.Д. Компьютерное моделирование водных ассоциатов / Д.Д. Гриншпан, А.В. Потоцкий // Вода, изменение климата и здоровье человека: Тезисы докладов Междунар. молодежн. форума, Минск, 25-26 ноября 2009 г./ Белорус. гос. ун-т; составители М.Г. Иванец, А.Н. Трифонова, И.М. Кимленко. Минск: Рэйплац, 2009. С. 64-66

15. HyperChem program package Professional 8.0; Hypercube, Inc: Gainesville (FL, USA).



D.D. Grinshpan, A.V. Polotskiy, A.N. Gonchar

## LIQUID WATER STRUCTURE. NEW APPROACH

New criteria for hydrogen bonding have been suggested. Only one hydroxyl group can take part in the process of hydrogen bonding. When proton being linked with the 2nd hydroxyl group electron density redistribution takes place, with decomposition of hydrogen bond of the 1st hydroxyl. Water possesses high solvent capacity due to free

hydroxyl group presence. As a result water molecule can simultaneously participate not more than in 2 hydrogen bonds. Only if ions are in the water 3 hydrogen bonds can be obtained. Only three types of clusters (hexamers, tetramers, trimers) exist in liquid water under standard atmosphere pressure and temperature ranging from 0 °C – 100 °C.

Intramolecular transitions as a result of temperature ranging account for unique water's physical and chemical properties.

**Key words:** liquid water structure, water's physical and chemical properties, water clusters, quantum model for water

