

Структурные особенности малых кластеров воды

© **Седунов Борис Иванович**

Российский новый университет. Ул. Радио, 22. г. Москва, 105005.

Тел: (499) 731-08-37. E-mail: Sedunov.b@gmail.com

Ключевые слова: *реальный газ, водяной пар, теплофизические свойства, межмолекулярные взаимодействия, энергия связи.*

Аннотация

Разложение ряда теплофизических свойств водяного пара, в частности коэффициента Джоуля-Томсона, по степеням плотности содержит заметные квадратичные составляющие, что говорит о существенной роли четырёхчастичных кластеров. Разработан феноменологический метод оценки параметров межмолекулярной связи: эффективной энергии и эффективного объёма связи, в молекулярных кластерах на основании доступных таблиц теплофизических свойств реальных газов. Получены оценки величин эффективных параметров межмолекулярной связи для димеров, тримеров и катромеров воды, на основании которых сделаны выводы о преобладающих типах структуры этих кластеров в парах воды. Показано, что тримеры в парах воды в основном существуют как изомеры с разомкнутой цепью, с двумя водородными связями и с большой подвижностью звеньев, что говорит о подобии движения молекул в тримерах движению молекул в капле воды. Преобладающий изомер катромеров, напротив, имеет жёсткую структуру с восемью водородными связями, с ограниченной свободой движения молекул и выглядит как прототип снежинок.