

Физико-химические свойства воды и ее гексамерный кластер

© **Урядов Владимир Георгиевич**

Кафедра органической химии. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-43-81. E-Mail: vguryadov@mail.ru; uryadov@kstu.ru

Ключевые слова: вода, гексамерный кластер, декамерный кластер, структура, топологический индекс, физико-химические свойства.

Аннотация

Величина произведения молярной массы на значение топологического индекса Винера в степени $2/3$, обозначенная как J_w , применена для описания физико-химических свойств воды и ряда протонодонорных органических жидкостей. Структура воды рассмотрена в форме гексамерного и декамерного кластера. Органические жидкости рассмотрены в форме димерных и тримерных ассоциатов. Для значений величины J_w , соответствующих указанным надмолекулярным образованиям, построены корреляции с давлением насыщенного пара при 432.2 К, температуры кипения, плотности, поверхностного натяжения, вязкости, мольной теплоемкости и энтальпии плавления. Во всех случаях значения соответствующие водному кластеру составляли единый массив с подобными значениями для ассоциатов органических жидкостей, что рассматривается как закономерное явление. Отмечена стабильность водного гексамерного кластера. Высказаны предположения о причинах его стабильности.