



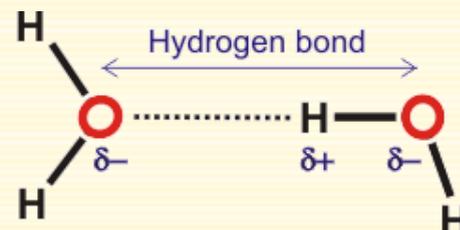
WATER STRUCTURE AND SCIENCE

Martin Chaplin



Водородных связей в воде (1)

Водородная связь в воде динамического притяжения между соседними молекулами воды с участием одного атома водорода находится между двумя атомами кислорода.



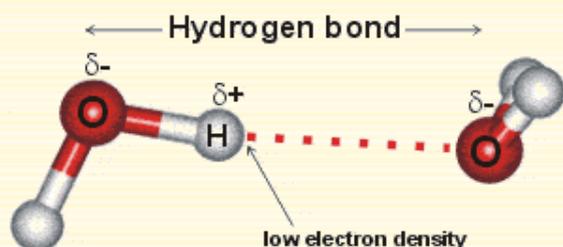
- < Водородные связи
- < Вода димер
- < Введение
- < Водой водородные связи
- < Длина водородной связи воды
- < Воды направление водородной связи
- < Кооперативность водородных облигаций
- < Квантовые эффекты
- < Воды водородная связь 'провода'
- < Перегруппировка водородных связей
- < Раздвоенный водородных связей
- < Передачи информации
- < Водородных связей и растворимость

Таким образом, каждый атом водорода связан с двумя атомами кислорода; несомненно, он более тесно связан с одним из атомов кислорода, чем другие'

Y. Zachariassen 1935 [†]

Введение

Форм водородных связей в жидкой воде как атомы водорода одной молекулы воды притягивается к атому кислорода соседней молекулы воды; как правило, Протон разделяют две пары одинокий электрон. В **воде молекулы** (H_2O), кислород ядра с +8 зарядов притягивает электроны лучше, чем ядра водорода с +1 заряд. Следовательно, атом кислорода имеет частично отрицательно заряженным, а атом водорода частично положительный заряд. Атомы водорода не только ковалентно привязаны к своим атомам кислорода, но также привлекает других близлежащих атомов кислорода. Это притяжение лежит в основе водородных облигаций.



Воды водородная связь-это слабая связь, не сильнее, чем о ХХ прочности О-Н ковалентная связь. Она достаточно сильна, однако, чтобы поддерживать тепловые колебания, и ниже температуры окружающей среды. ^a Притяжение О-С связующих электронов в сторону атома кислорода возникает дефицит на дальней стороне атома водорода относительно атома кислорода. В результате сила притяжения между О-С водорода и о-атомом соседней молекулы воды является самым сильным, когда три атома находятся в близко к прямой линии, и когда о-атомы ближе

чем 0,3 нм. В воды оптом в любой момент, ожидается, что сильные тетраэдрически-размещены водородные связи образуют сеть (сетка) протяженностью всей жидкости, который подает воду по физическим свойствам, а также меньшее количество изолированных слабо или сломанные связанных водородными связями молекул воды [2695].

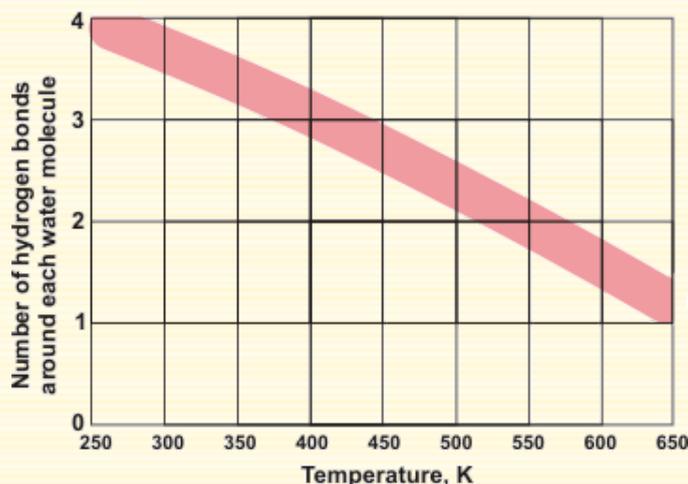
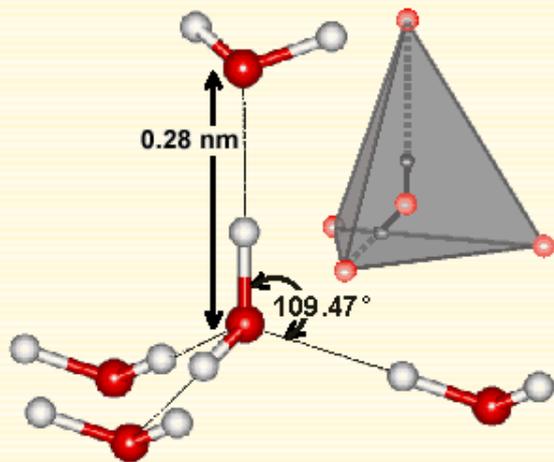
Каждая молекула воды может образовать две водородные связи с участием атомов водорода плюс две дополнительные водородные связи с использованием водородными атомами соседних молекул воды. Эти четыре водородные связи оптимально организовать себя тетраэдрически вокруг каждой молекулы воды как найти в обыкновенного льда (см. справа). В жидкой воде, тепловой энергии гнется и растягивается и иногда рвется эти водородные связи. Однако "средняя" структура молекулы воды похож на этот четырехгранный договоренности. На схеме показана типичная "средняя" группа из пяти молекул воды. В **икес** это тетраэдрических кластеров обширна, производства кристаллических форм. В жидкой воде, тетраэдрические кластеры только локально нашли и уменьшается с повышением температуры. Однако, скрепленные цепями водорода еще соединить жидкие молекулы воды разделены большими расстояниями.

Существует баланс между прочностью водородной связи и линейности, что сильные водородные связи возлагают на местные структуры. Чем сильнее узы, тем более упорядоченной и статические является

результатирующей структуры. Энергетические затраты расстройства пропорциональна температуре, будучи меньше при более низких температурах. Вот почему структура жидкой воды является более упорядоченной при низких температурах. Это увеличение упорядоченности в воде, так как температура опускается гораздо больше, чем в других жидкостях, благодаря силе и предпочитаемое направление водородных связей и является основной причиной весьма необычными свойствами воды. [Вернуться к началу ▲]

Водой водородные связи

В жидкой воде, молекулы воды имеют по меньшей мере одну водородную связь с соседними молекулами воды фактически нет свободных молекул воды в условиях окружающей среды (т. е. молекул без водородных связей). Существуют две основные гипотезы относительно водородных связей жидкой воды, которые делят наука о воде; либо (в) вода является фактически непрерывным трехмерную сеть водородных связей, более или менее искаженным от своего идеала трехмерную структуру, или (б) воды в основном состоит из смеси кластеров молекул воды с различной степенью водородных связей в равновесии. Многие свойства воды легко объясняются с помощью последней модели, который также поддерживает ряд экспериментальных методов.

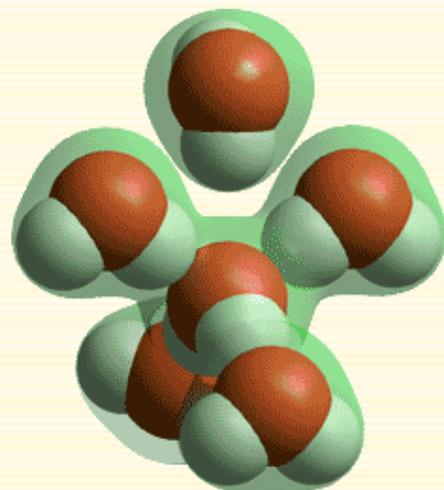


Молекулы воды в твердом и низкой температуре воды являются исключительными, среди водородных связей молекулы, в том, что примерно в два раза больше водородных связей в ковалентные связи вокруг каждой молекулы и, в среднем, как многие водородные связи как ковалентные связи. На картинке слева-число водородных связей вокруг каждой молекулы воды при повышении температуры с линией ширины, показывающий примерное неравенство между различными экспериментальными методами (данные из [2264]). Хотя есть сообщения о воде в окружении более четырех водородных связей (например 5 или 6) эти водородные связи не могут быть пространственно размещены вокруг центральной молекулы воды, не будучи расположенным значительно дальше от центральной кислорода (см. ниже) плюс один или более из первоначальных четырех

водородных связей, существенно ослабла.

Таким образом, они могут быть **раздвоенные**, где облигации облигации по сути, разделили между собой молекулы воды (например, две облигации а не Бонд). Нет стабильного водного кластера (например, в кристаллической структуре) с центральной молекулой воды 5-координируется водородных связей до пяти молекул воды.

В воде водородные связи, атом водорода, ковалентно присоединенными к кислорода в молекулу воды ($492.2145 \text{ кДж моль}^{-1}$ [350]), но (оптимально) дополнительное привлечение (около $23,3 \text{ кДж моль}^{-1}$ [168]). Это энергия (H), требуемое для разрушения и полностью отделяя облигаций, и должна равняться примерно половина **энтальпии испарения**. На той же основе $\Delta S = 37 \text{ Дж град}^{-1} \text{ моль}^{-1}$ [168]. (Ниже энтальпии водородной связи не поступало [1369], колеблется от $\sim 6-23 \text{ кДж моль}^{-1}$, с энтропий $\sim 29-46 \text{ Джей град}^{-1} \text{ моль}^{-1}$ в зависимости от сделанных предположений). Просто разрыв водородной связи в жидкой воде, оставляя молекулы по существу в том же положении, требуется лишь около 25% этой энергии; в последнее время оценивается на уровне $6,3 \text{ кДж моль}^{-1}$ [690] и только в два раза больше средняя энергия столкновения ^В случае, если энергии связи водорода определяется избыточная теплоемкость жидкости более, что пара (при условии, что этот избыток тепловой мощности, приходящейся на разрыв связей) с $f = 9.80 \text{ кДж моль}^{-1}$ [274]. Ряд оценок приведены эквивалентные ΔG около 2 кДж моль^{-1} при $25 \text{ }^\circ\text{C}$ [344]; однако от равновесного содержания водородных связей (1.7 моль^{-1}) это $-5.7 \text{ кДж моль}^{-1}$. Водородных связей во **льду их** составляет около 3 кДж моль^{-1} сильнее, чем жидкая вода ($= 28 \text{ кДж моль}^{-1}$ при 0 K , от решетки энергии, в том числе невалентных взаимодействий) и свидетельствует около 4 часов и дольше, и, следовательно, слабее, O-H ковалентная связь. Однако водородная связь силы в



переохлажденной жидкой воды может быть сильнее, чем в лед [2020]. Водородная связь силы почти в пять раз средний тепловой столкновения колебания при 25 °С^В к соседнему атому кислорода другой молекулы воды и намного больше любой ван-дер-ваальсова взаимодействия.

Водородные связи в тяжелой воде сильнее. Неожиданно для такого важного параметра, существует некоторый спор относительно того, водородные связи в D₂O и H₂O являются длиннее или короче или такой же длины. Один докладе говорится (напротив ранее выводы [554]), что D₂O водородных связей более (C···O'1.74 Å, D···O 1.81 Å при температуре 23 °C [1485], но более линейный; ослабление на удлинение компенсируется укреплением на выпрямление) и D₂O водородных связей более асимметричной (с атома водорода больше смещается от центра O-H···o связи), более четырехгранные, обильнее и сильнее, чем в H₂O в [1485]. Еще совсем недавно водородных связей в D₂O и H₂O и были найдены, чтобы быть приблизительно одинаковой длины за счет компенсаторных квантовые эффекты [1752]. Водородная связь в T₂O будут еще сильнее. Таким образом, учитывая выбор, водородные формы с предпочтением



Склеивание вода водород удерживает молекулы воды примерно на 15% ближе, чем если бы, чем если бы вода была просто жидкость с ван-дер-Ваальсовых взаимодействий дисперсии. Однако, как водородная связь является направленной, он ограничивает число соседних молекул воды около четырех, а не большее количество встречается в простых жидкостях (например, атомы ксенона имеет двенадцать ближайших соседей в жидком состоянии. Образование водородных связей между молекулами воды приводит к возникновению крупных, но в основном компенсации, энергичный изменения энтальпии (становится более отрицательным) и энтропии (становится менее положительным). Оба изменения не особо большие, основанной на массе или каждого Тома, из-за небольшого размера молекулы воды. Это энтальпийно-энтропийной компенсации почти завершена, однако, с тем последствием, что очень маленький, введенной enthalpic и энтропийные эффекты могут оказывать существенное влияние на водные системы. Вполне возможно, что водородные связи между **пункт-ч.2 вывода**, не имеющих основного состояния спин, сильнее и дольше, чем водородные связи между **орто-H₂O** [1150].

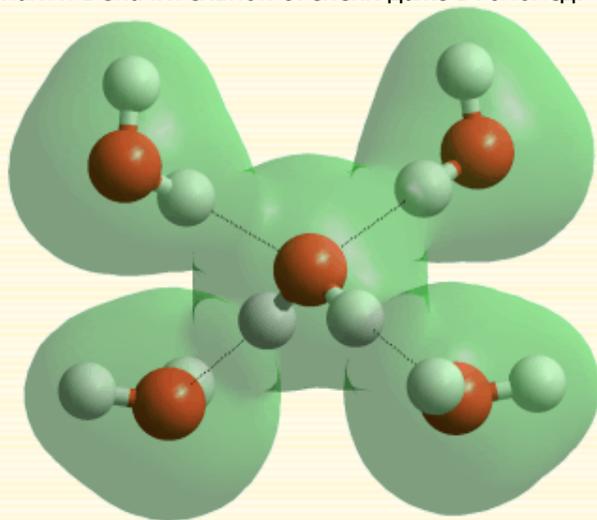
Водородная связь в воде часть (около 90%) электростатическое и часть (около 10%) электронный обмен, который носит ковалентный характер [96] (см. **обсуждения**) и может быть аппроксимирован облигаций составила ковалентных $\text{ho-c}^{\delta-}\cdots\delta^+\text{O}_2$, Ионное $\text{ho}^{\delta-}\text{c}^{\delta+}\cdots\text{o}^{\delta-}\text{c}_2$, и долго-связанного ковалентной $\text{ho}^{\delta-}\text{c}^{\delta+}\text{O}^+\text{c}_2$ частей с $\text{ho-c}^{\delta-}\cdots\delta^+\text{O}_2$ очень гораздо больше доказательств, чем $\text{ho}^{\delta-}\text{c}^{\delta+}\text{O}^+\text{H}_2$, там будут много лишнего невалентных отталкивания. Движение электронов от атома кислорода в O-C антисвязующими орбиты на соседнюю молекулу ($\text{ho-c}^{\delta-}\cdots\delta^+\text{O}_2$) как ослабить ковалентные O-H связи (так его удлинения) и снижает $\text{ho-c}^{\delta-}\cdots\text{O}_2$ 'водород' облигаций. Водородная связь влияет на все молекулярные орбитали, включая даже внутренний O1s (**1b₁**) орбиталь, которая связана 318 кДж моль⁻¹ (3.3 эВ) меньше, сильно в тетраэдрически связанных водородными связями объемной жидкой фазе по сравнению с газовой фазой [1227]. [**Вернуться к началу** ▲]

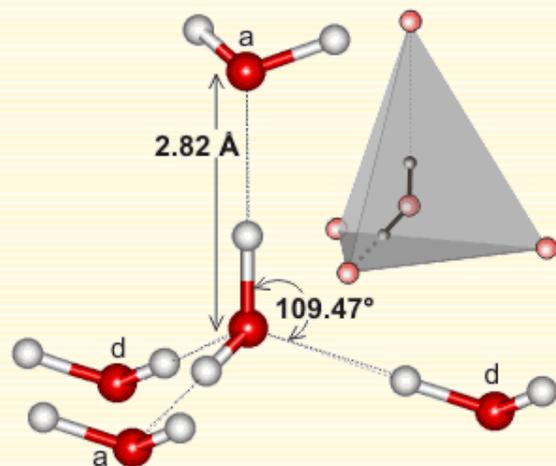
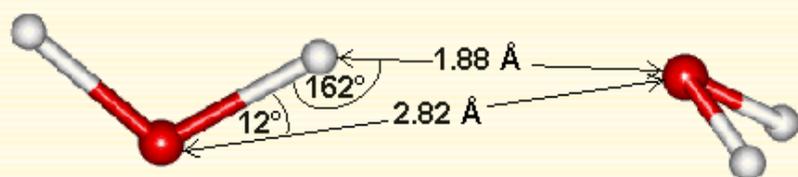
Длина водородной связи воды

Хотя атомы водорода часто показывали по линии, соединяющей атомы кислорода, это теперь считается показателем усредненной по времени позиции и вряд ли можно найти в значительной степени даже в гололед.

Жидкая вода состоит из смеси короткие, прямые [2405] и сильными водородными связями и длинные, слабые и изогнутые водородные связи со многими промежуточными между этими крайностями. Короткие водородные связи в воде тесно связаны с их прямее [1083]. Протон Магнитное экранирование исследования дают следующие средние параметры для мгновенного структура жидкой воды при 4 °C; нелинейность, расстояний и отклонений; все растет с температурой [458].

Обратите внимание, что две молекулы воды не ограничивается перпендикулярных плоскостях и лишь небольшая часть водородных связей, вероятно, это усредненная структура.

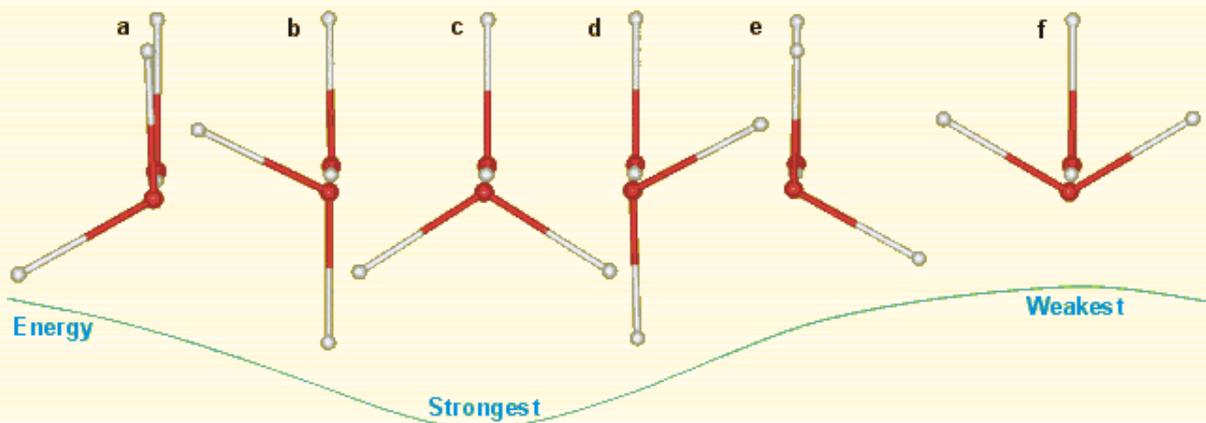




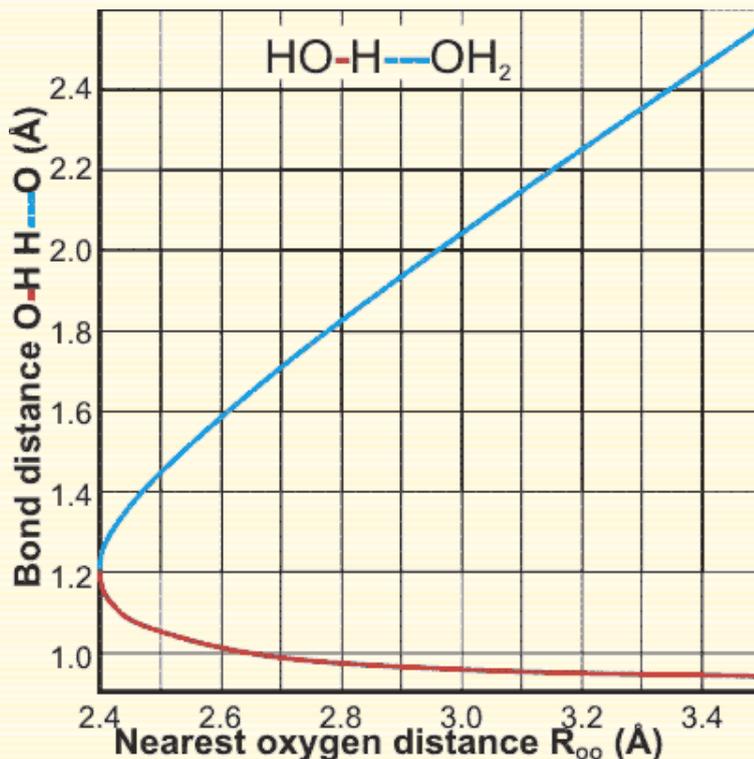
Длины водородных связей воды зависит от температуры и давления. Поскольку ковалентные связи различаются значительно меньше при изменении температуры и давления, большинство из уплотнения льда их за счет снижения температуры или повышение давления из-за уменьшения длины водородной связи. Это водородная связь длина вариация может быть показано с изменением объема льда их [818]. Как водородная связь силы зависит почти линейно по его длине (короче длина давать более сильных водородных связей), оно также зависит почти линейно (за пределами крайних значений) от температуры и давления [818].

Обратите внимание, что в жидкой воде, водород скрепленный расположения большинства молекул не такой симметричной, как **показано здесь**. В частности, позиционирование молекул воды жертвывая водородных связей в принимающей позиции на молекулы воды (то есть, молекулы воды в **схеме выше**, с надписью "д"), вероятно, будут менее тетраэдрически размещены, **электронной** связи с отсутствием существенной тетраэдрически расположены 'одинокая параэлектрон', чем те молекулы воды, которые были переданы из воды молекулы (т. е. молекулы воды сверху и спереди в **схеме выше**, меткой "а" [1224]. Кроме того, композиция может состоять из одной пары больше тетраэдрически расположены сильными водородными связями (один донор и один акцептор) с оставшихся водородных связей пары (один донор и один акцептор), либо около 6 кДж моль^{-1} слабее [573], менее тетраэдрически расположены [373, 396] или раздвоенные [573]; возможно, в основном из-за anticooperativity эффектов, упомянутых **в другом месте**. Такое разделение воды на высшие (4-хромосомой) и нижней (2-хромосомой) водородная связь координированной воды, как было показано путем моделирования [1349]. **Рентгеновская спектроскопия поглощения** подтверждает, что, при комнатной температуре, 80% молекул воды в жидкой фазе один (совместно укреплять) сильная связанных водородными связями О-Н группы и один, или слабо проклеенной О-Н группы в любой момент (подпункт фемтосекундного среднем и как это может произойти в **пятиугольных связанных водородными связями кластеры**), остальные 20% молекул из которых состоит из четырех-водородно-связанных тетраэдрически координированных кластеров [613]. Существует много споров относительно того, как такая структура представляет более усредненные по времени структуры, который понимают некоторые, в основном тетраэдры [1024]. ^Ф Даже если мгновенная связанных водородными связями расположение тетраэдрических, искажения электронной плотности распределения может вызвать водородных связей имеют различные преимущества [1979, 2095].

Последние молекулярные параметры воды приведены **в другом месте**. $\text{O} \cdots \text{O}$ расстояние в **лед их** варьируется в диапазоне $2,75 \text{ \AA}$ (0 К) и $2,764 \text{ \AA}$ (253 К). Энергия линейной водородной связи зависит от ориентации молекулы воды относительно водородной связи. В ненатянутом тетраэдрической сети (например, **лед ИЖС**) только ниже шести конструкций могут возникнуть без структур на промежуточных углах. Водорода энергия связи зависит, в частности от угла вращения вокруг водородной связью, как показано ниже, за счет взаимодействия молекулярных диполей. Отметим, что водородные связи в структуре пар (**а**) и (**Е**), и (**Б**) и (**Г**) имеют одинаковые энергии. В **лед их** с чистого дипольного момента, в конфигурациях с особой СНГ/транс коэффициенты 56.3% СНГ (т. е. **А+Е+Ф**) или 64,7% транс (то есть **Б+С+Д**), но расчетную разницу в энергиях был лишь 0,12% ($0,06 \text{ кДж моль}^{-1}$) [858]; гораздо ниже, чем ожидалось (несколько кДж моль^{-1}) разница в энергии между ограничивающими транс и СНГ, структуры **с** и **Ф**. Как **А**, **С** и **Е** связаны протонов в водородных связях параллельно с-оси, их повышенная прочность по отношению к **Б**, **Д** и **Ф** могут быть возбудителями в (0.3%) сокращается С-оси в **лед их** элементарной ячейки.



Существует компромисс между ковалентной и водородной связью: чем сильнее водородная связь, тем слабее ковалентная связь, а короче $O \cdots O$ расстояние [1928] (см. справа, где длины связей равны, если, по крайней мере, 62 ГПа давления и атмосферного давления ($\sim 0,1$ МПа) вода имеет среднее расстояние до ближайшего кислорода около 2.82 \AA). Интересно, это означает, что ковалентная часть водородных связей становится короче, а температура воды увеличивается. Ослабление ковалентной связи приводит к хорошему индикатору энергии водородных связей; частичное увеличение ее длины определяется увеличением прочности водородных связей [217]; например, когда давление существенно увеличивается (\sim ГПа) оставшиеся водородные связи ($H \cdots O$) вынуждены сокращаться [655] и вызывают **О-Н ковалентные связи продолговатым**. Водородные связи могут влиять **электромагнитные и магнитные эффекты**. Диссоциация является редким событием, происходящим только два раза в день, только один раз на каждые 10^{16} раз водородная связь разрывается.



В **аномальные свойства** жидкой воды может быть объяснено, прежде всего, на основе водородных связей [1530]. [\[Вернуться к началу ▲\]](#)

Воды направление водородной связи

Важной особенностью водородной связи является то, что она имеет направление; Конвенцией этим направлением является то, что короче $O-H$ (\rightarrow) ковалентная связь ($O-H$ атом водорода безвозмездно уплотнительное атом акцептора атома на другой H_2O в молекуле). В 1H ЯМР - исследования, химический сдвиг протонов, участвующих в водородных связях переходит около $0,01$ промилле κ^{-1} удар в область более низких частот (плюс около $5,5$ промилле дальше мяч в пар при $100 \text{ }^\circ C$); то есть, становится более экранированным с **уменьшение прочности водородных связей** [222, 1935], а температура повышена; аналогичный эффект может быть видно в воде ^{17}O часов НМР, двигаясь около $0,05$ промилле κ^{-1} , но плюс $36-38$ промилле дальше мяч в пар при $100 \text{ }^\circ C$. ⁶ Увеличением количества водородных связей в кластерах приводит к подобный эффект, то есть высшее ЯМР химических сдвигов с большей кооперативности [436], короче, связанных водородными связями $O-H \cdots O$ расстояниях [1616], меньший атомный объем атома водорода, большой положительный заряд на атомы водорода и большого отрицательного заряда атома кислорода. Прочность связи зависит от ее длины и угла, с сильных водородных связей в воде, существующие в коротких линейных Протон-ориентированный **$H_5O_2^+$ ионов** около $120 \text{ кДж моль}^{-1}$. Тем не менее, небольшие отклонения от линейности в связи углом (до 20°), возможно, имеют сравнительно незначительное влияние [100]. Зависимость длины связи очень важно, и было показано, экспоненциально уменьшается с расстоянием [101]. Некоторые исследователи считают, что водородная связь будет нарушена ^c, Если длина связи больше, чем 3.10 \AA или облигаций угол менее 146° [173],^A хотя первопринципные расчеты показывают, что большая часть энергии связи по-прежнему остается и больше

загибается, но короче облигаций может быть достаточно сильным; к примеру, один из водородных связей во льду-четыре (143°). Подобным же образом о взаимодействии энергий ниже 10 кДж моль⁻¹ были приняты как ориентировочные разорванных водородных связей, хотя они почти на 50% так сильны, как 'отлично' водородных связей и нет оснований предполагать, что это исключительно водородная связь, которая была, пострадавших нет взносы от других взаимодействий. Кроме того, прочность склеивания должна зависеть от ориентации и позиции других кабалный и неметаллическими атомами и неподеленной электронной пары электронов [525]. [\[Вернуться к началу ▲\]](#)

Сноски

^a средний молекулярный линейный трансляционный энергия RT/2. Средняя энергия столкновения RT (2.479 кДж моль⁻¹). 2% конфликтов имеют энергию большую, чем энергия, необходимая для разрыва связей (9.80 кДж моль⁻¹, [274]), которые определяются избыточной теплоемкости. [\[Назад\]](#)

^b К сожалению, это трудно использовать в качестве инструмента, однако, из-за осреднения сдвиг и сложность системы. В спинрешеточной релаксации (T₁, ~3.6 с, 25 °C) воды протонов также зависит от водородных связей, короче для более прочного склеивания. Влияние растворенных веществ, однако, показывает, что химический сдвиг и спин-решеточная релаксация времени не коррелированы, так как обмен веществ может снижать степень водородного связывания, в то же время, как растет его сила [281]. Спин-решеточная релаксация время было установлено, что два или три раза больше, чем спин-спиновой релаксации, что свидетельствует о наличии надмолекулярной структуры в воде [1664]. [\[Назад\]](#)

^c Была ли водородная связь является сломанной или просто растягивается и/или изгибов должен быть определен по силе, но, как изолированные прочность соединения может быть трудно определить, часто это остается предметом произвольного определения на основе измерения расстояний и углов. Договоренность с напряженными геометрии очень вряд ли долго продержится. Он может, однако, возникнуть при поломке, формирование или партнер-переключение (то есть бифуркации) водородная связь или возникают временно, в результате термического воздействия или других молекулярных взаимодействий, в долгоживущих водородная связь. Время жизни водородной связи (если более 10⁻¹³ с) представляет еще один показатель водородная связь образования, но это также страдает от неопределенности в определении своей геометрии. Сломанный водородные связи не делятся долго достаточно, чтобы представить свободный гидроксил (О-Ч) инфракрасного спектра (<10⁻¹⁴ - 10⁻¹³ с) [1687]. Множество определений водородных связей предполагает теоретически поддерживается резкого выжима отделяя водород-связанных с не связанные молекулы. Часто они включают в себя значительные переходные поломки, которые следует рассматривать как артефакт определение занятых [2417]. [\[Назад\]](#)

^d другие рабочие используют более щедрым параметров; например, в [848], водородная связь длина должна быть менее 3,50 Å и облигаций угол более 120°, в то время как другие предполагают, водородных связей, основанные на ближайших соседей [1432]. Важность выбора правильного определения водородных связей рассматривается [1240]. Простой критерий расстояния 2.50 Å для n-о расстояния была найден очень полезный и дешевый в вычислительном плане, тогда как методы, основанные на энергии оказались бедными. Добавление дополнительных критериев, таких, как валентные углы, доказал предельной использовать [1240]. Шесть различных водородных связей определений описаны в [1555], где все они дали такую же качественную картину спектроскопии. С помощью моделирования было высказано предположение, что чисто геометрические и энергетические определения являются неточными, так как они могут переоценить возможности подключения и время жизни водородных связей и не может отличить неправильное относительной ориентации [1335]. Такие переоценивает может, однако, быть сбалансирован занижает оценки из-за отсечения параметров. Разница между О-Н И ч-ч о длин связей также, где воды по водородной связи дает разницу с колебаниями около 0.75 Å (с валентные углы ~155° - 180°) и облигаций считается неработающей с о-ч ч-ч о связи длина различий разной узлами угол (180° 1.67 Å; 135° 1.53 Å; 90° 1.40 Å), или просто для водородных связей значительные силы (площадью около 99% воды водородными связями), где о-ч ч-ч о связи длина разница менее 1.25 Å [2025]. Некоторые методы для определения воды водородной связью были сравнены и проанализированы [2028]. [\[Назад\]](#)

^e четырехгранный угол 180-потому что⁻¹(1/3)°; 109.47122° = 109° 28' 16.39". Tetrahedrality (вопрос, ориентационного параметра порядка) может быть определена как $q = 1 - \frac{3}{8} \sum_{j=1}^3 \sum_{k=j+1}^4 \left(\cos \psi_{jk} + \frac{1}{3} \right)^2$, где ψ_{jk} в это угол, образованный линиями, проведенными между кислородными атомами четырех ближайших и водородно-связанных молекул воды [169]. Он равен единице для идеально четырехгранный крепления (где $\cos(\psi_{jk}) = -1/3$) и средние значения ноль (±0.5 СД) для случайных мероприятий, с минимальное значение -3. Плотность

порядком параметров , описанных в других и этих и других геометрических параметров порядка, характеризующих локальную структуру жидкой воды и ее четырехгранной договоренности были описаны и сопоставлены. Аналогичное уравнение может быть использовано для испытания сцепления тригональная с

идеальными углами 120° : $q_3 = 1 - \frac{4}{7} \sum_{j=1}^2 \sum_{k=j+1}^3 \left(\cos \Psi_{jk} + \frac{1}{2} \right)^2$. [Назад]

Ф толкование структуры воды в условиях пряди и кольца двусвязный водородно-связанных молекул [613] не подтверждается Комптоновского рассеяния исследование [1083], где данные соответствуют 3.9 водородных связей ($R_{OO} \leq 3.2 \text{ \AA}$) вокруг каждой молекулы воды, и было опровергнуто при этом другой рентгеновского поглощения спектроскопическое исследование [690a], который представляет собой чехол для 'не-или слабо, кабальный О-Н групп, чтобы сформировать большинство О-Н группы и эти группы более сильно связаны. Также Wowron проблем выше интерпретации (то есть, [613]) в обсуждении включенных в [746] и Рамановские исследования поддерживает полностью тетраэдрически связанных водородными связями модель [875]. Этот спор, как думали, было разрешено неэмпирическое молекулярно-динамическое исследование [832], что показывает 170 ФС колебаний в 2,2 раза сила между двумя донорами водородных связей у каждой молекулы воды, в то время как Геометрическая связь сохраняется, в соответствии с гипотезой первый представлен выше. Однако это исследование [832] вызвал серьезную критику [1159], оставив его выводы, казалось бы бездоказательно. Последние неэмпирических расчеты рентгеновского сечение жидкой воды показывает только 20% обрыв водородных связей присутствуют [1059], другие неэмпирические расчеты показывают, прежде всего четырехгранной координированных молекул воды [1654] и Роман силового поля для воды, созданное из первых принципов, дает 3.8 общая тетраэдрически координированные водородных связей на молекулу воды [1189]. Также неэмпирическое квантовой механики/молекулярной механики, молекулярной динамики исследование показывает, что усредненные по времени водородных связей составляет около четырех общих водородных связей на молекулу воды, текущее значение значительно меньше и составляет около 2,8 общая водородных связей на молекулу воды [922]. Тетраэдрически-координированных вода кажется наиболее приемлемым в настоящее время [2095], но ясно, что смесь меньшинство высших (4-хромосомой) и большинство ниже (2-хромосомой) водородная связь координированной воды могут быть установлены одинаково хорошо с экспериментальными данными [1350]. [Назад]

Г У. Zachariasen, жидкая "структура" метилового спирта, Ж. Хим. Физ.. 3, (1935,) 158-161. [Назад]

[Главная](#) | [Индекс сайта](#) | [водородная связь](#) | [воды водородных связей](#) | [вода молекула](#) | [Икес](#) | [LSBU](#) | [Топ](#)

Эта страница была создана в 2000 году и последний раз обновлялась [Мартин Чаплин](#) на 26 августа, 2016 ->->->



Эта работа лицензируется под [творческим Приписыванием палаты общин](#)
-Некоммерческое-нет производные работ 2.0 Великобритании: Англия и Уэльс
лицензии