

PRESENEČENJA V FIZIKI: NENAVADNE LASTNOSTI VODE

Mitja Rosina, Fakulteta za matematiko in fiziko

Ljubljana, 11. marca 2016

Pri molekuli vode H-O-H vodikova atoma nista na nasprotnih straneh kisika, temveč pod kotom $104,5^\circ$ zaradi usmerjenosti kovalentne vezi. To ima izredne posledice: molekule se nizajo v nekake nepopolne (krajše ali daljše) obroče, ki so prepoznavni tudi pri ledu. Zaradi tega ima voda nekaj čudovitih lastnosti, brez katerih življenje na Zemlji, kot ga poznamo, ne bi bilo mogoče.

PROGRAM PREDAVANJA

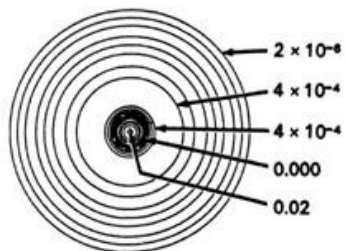
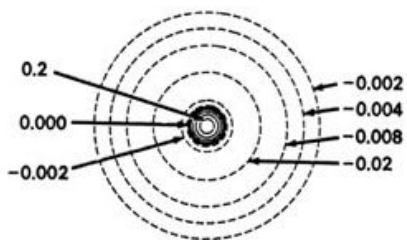
1. USMERJENOST KOVALENTNE VEZI
2. GOSTOTA VODE
3. GOSTOTA LEDU
4. SPECIFIČNA TOPLOTA
5. DIELEKTRIČNA KONSTANTA
6. VODA KOT TOPILO
7. DODATEK: KURJENJE

1. USMERJENOST KOVALENTNE VEZI

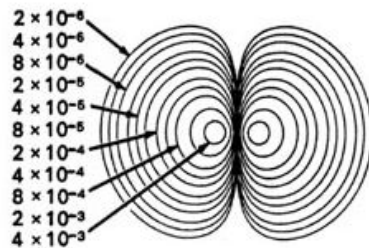
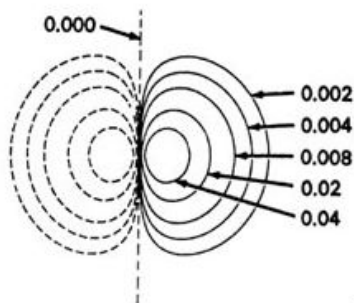
Napišimo lastne funkcije vodikovega atoma. Pri kisikovem atomu je radialna odvisnost sicer drugačna, kotna odvisnost je pa enaka. Valovne funkcije v (pod)lupini 1s in 2s so izotropne, medtem ko imajo tri degenerirane valovne funkcije v podlupini 2p izrazite maksime v smeri x, y in z, torej **POD PRAVIM KOTOM**. Na te maksime se “obesijo” vodikovi atomi, kar povzroči **USMERJENOST KOVALENTNE VEZI**.

Hydrogen Separated Equation Solutions						
n	l	m _l	F(φ)	P(θ)	R(r)	<input checked="" type="checkbox"/> n=1,2 <input type="checkbox"/> n=3 <input checked="" type="checkbox"/> Separated <input type="checkbox"/> Combined
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2} a_0^{3/2}} \left[2 - \frac{r}{a_0}\right] e^{-r/2a_0}$	
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	

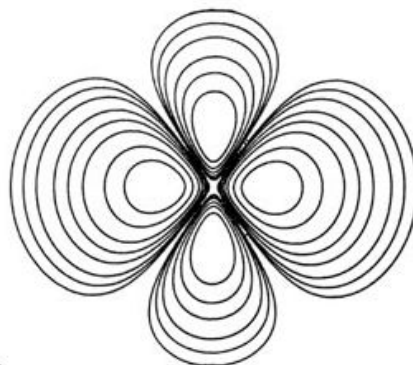
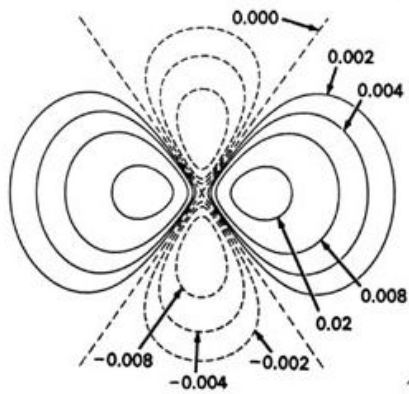
Source: Beiser, A., Perspectives of Modern Physics, McGraw-Hill, 1969. Table 9.1



2s



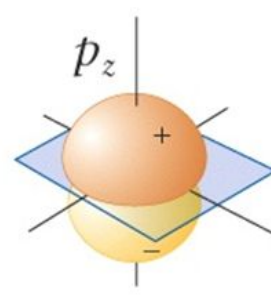
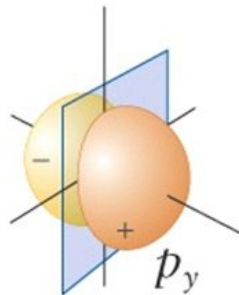
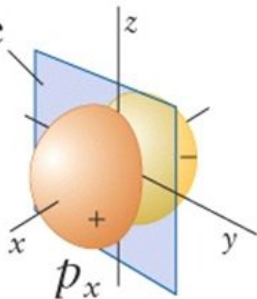
2p

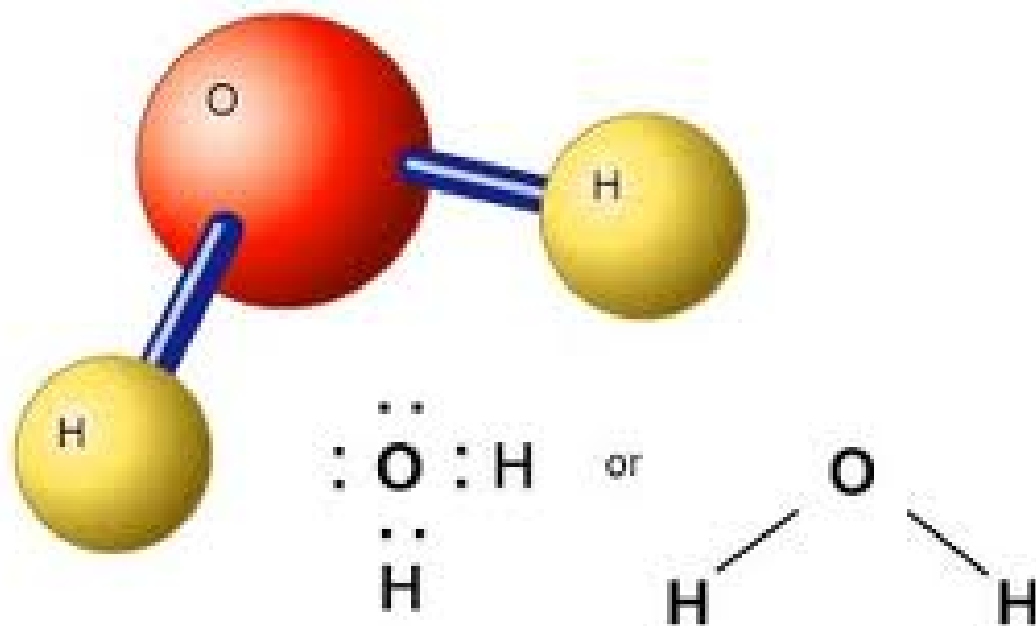


3d

	s ($\ell = 0$)	p ($\ell = 1$)			d ($\ell = 2$)					f ($\ell = 3$)						
	$m = 0$	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = \pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n = 1$	·															
$n = 2$	·															
$n = 3$	·															
$n = 4$																
$n = 5$									
$n = 6$				
$n = 7$	

Nodal plane

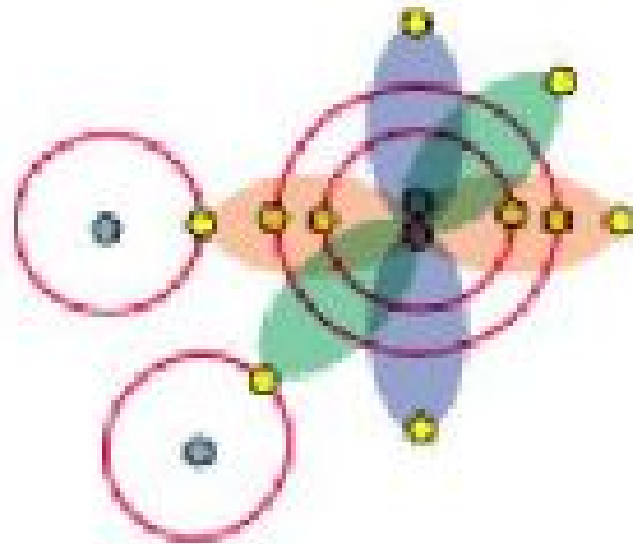




© 2006 Encyclopædia Britannica, Inc.

Hydrogen

Oxygen



Ker sta valenčni orbitali pravokotni med seboj, bi pričakovali med povezavama z vodikoma pravi kot. Toda elektrostatski odboj med protonoma molekulo nekoliko razkreči, na $104,5^\circ$.

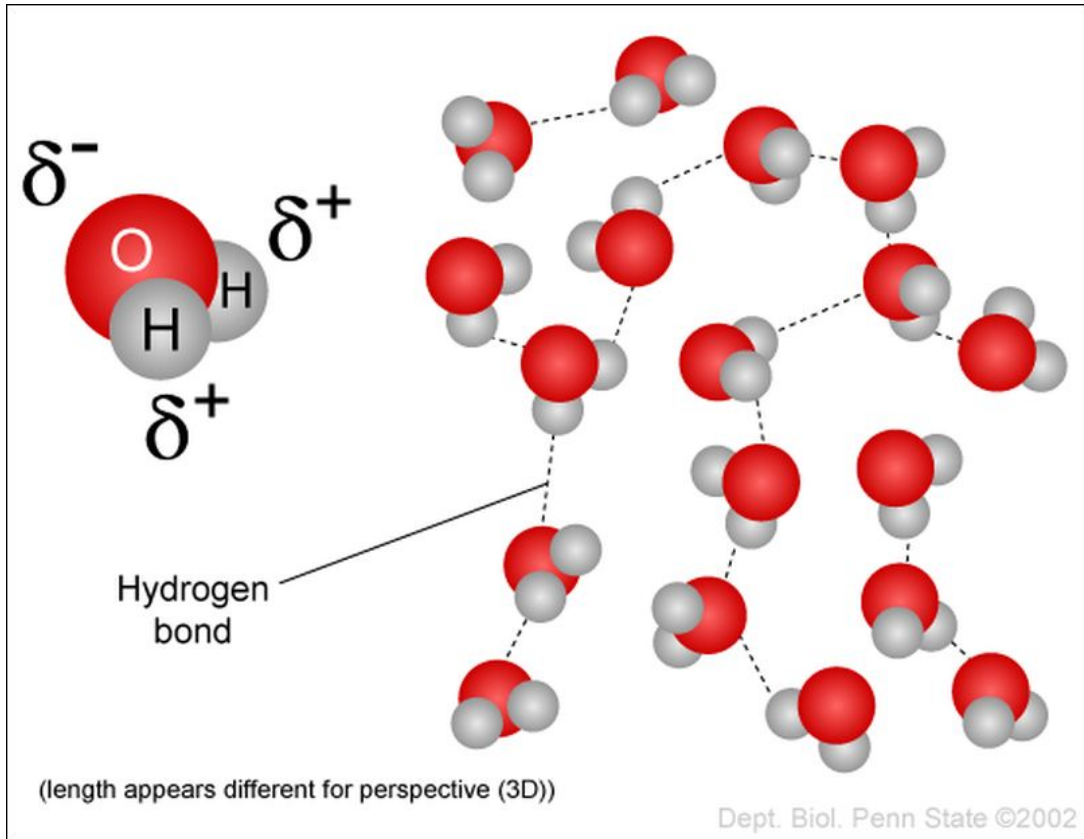
To razlago lahko podkrepimo s primerjavo s koti pri večjih molekulah, pri katerih je zaradi večje razdalje med vodikoma elektrostatski odboj manjši in je kot bliže 90° .

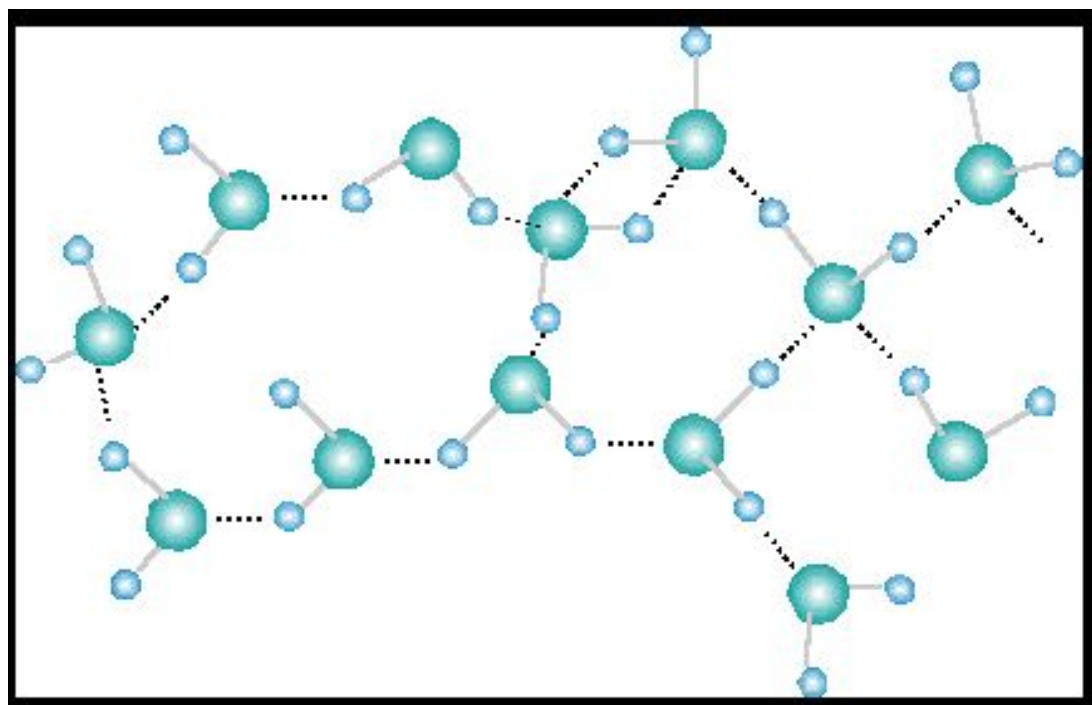
H_2O	$104,5^\circ$	NH_3	$107,8^\circ$
H_2S	$92,3^\circ$	PH_3	$93,5^\circ$
H_2Se	$91,0^\circ$	AsH_3	$91,8^\circ$
H_2Te	90°	SbH_3	$91,3^\circ$
		BiH_3	90°

CH_4	$109,5^\circ$
---------------	---------------

2. GOSTOTA VODE

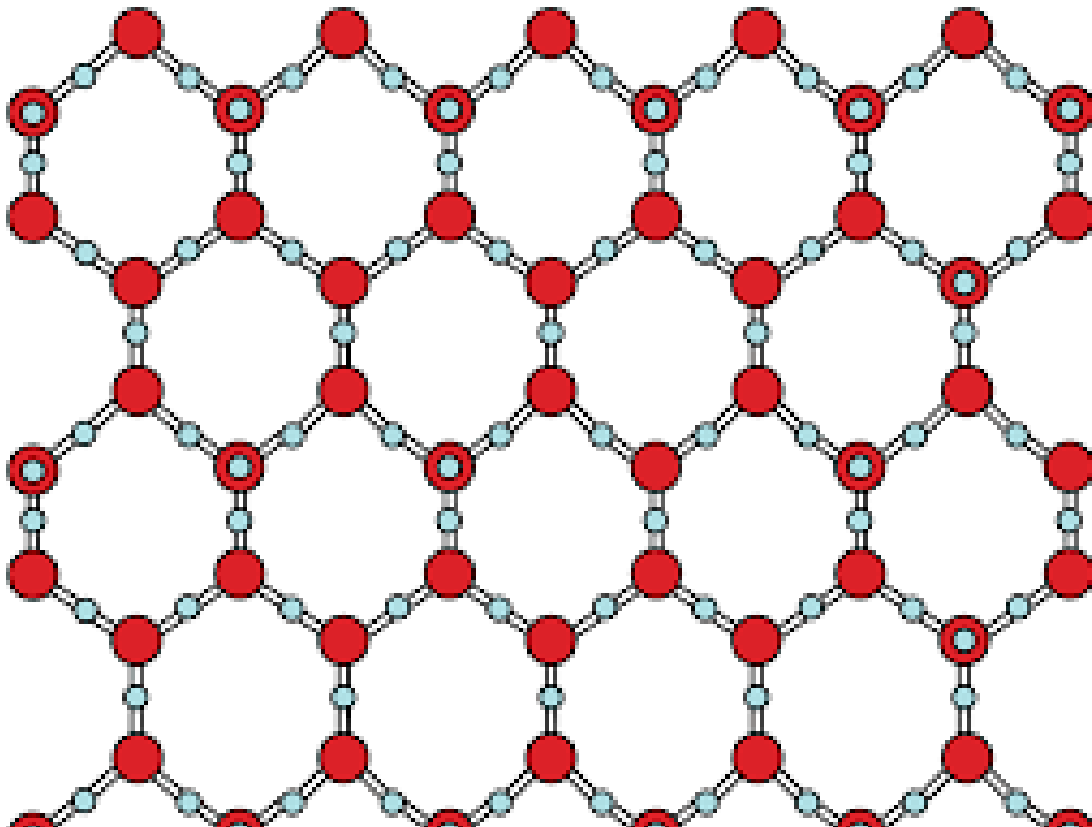
Voda ima razmeroma majhno gostoto zaradi votlin med obročmi.



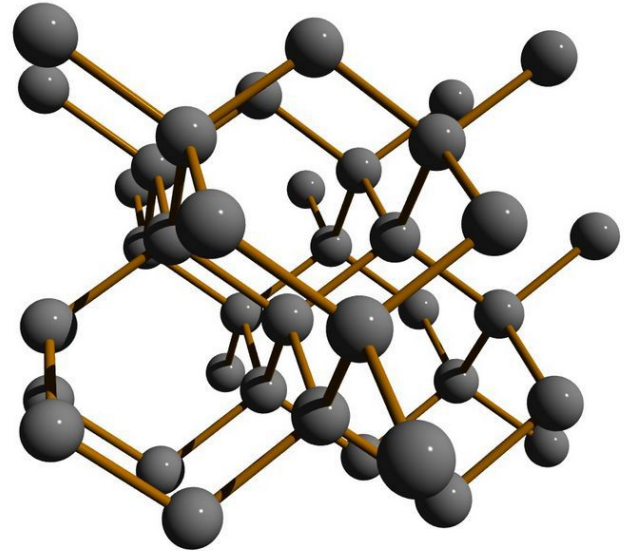
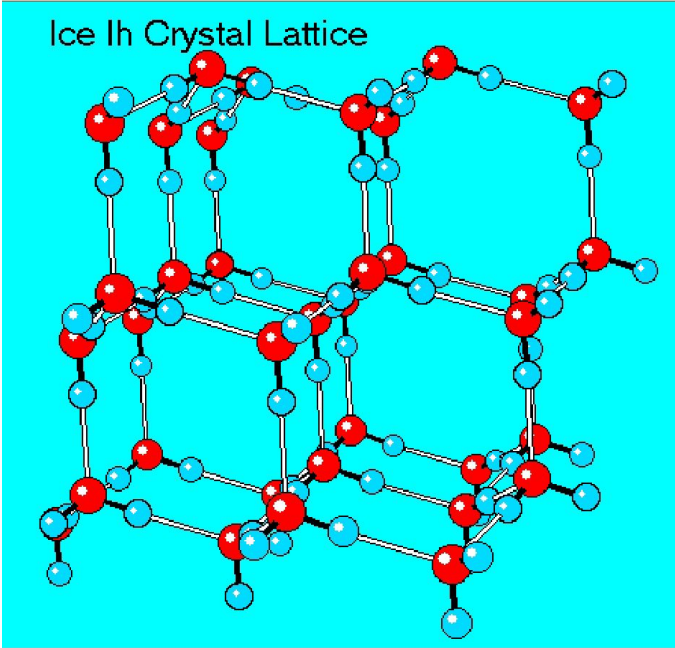


3. GOSTOTA LEDU

Voda ima razmeroma majhno gostoto zaradi votlin med obroči. Led ima še manjšo, ker so obroči popolnejši, zato plava na vodi. Če bi bil težji in bi potonil, bi jezera in oceani pozimi zmrznili in bi bila tudi poletja hladnejša.



Ice Ih Crystal Lattice

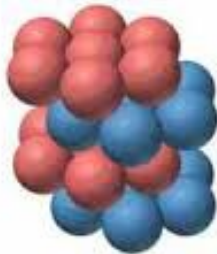


PRIMERJAVA KRISTALA LEDU
S KRISTALOM DIAMANTA



Close-packed
layer of spheres

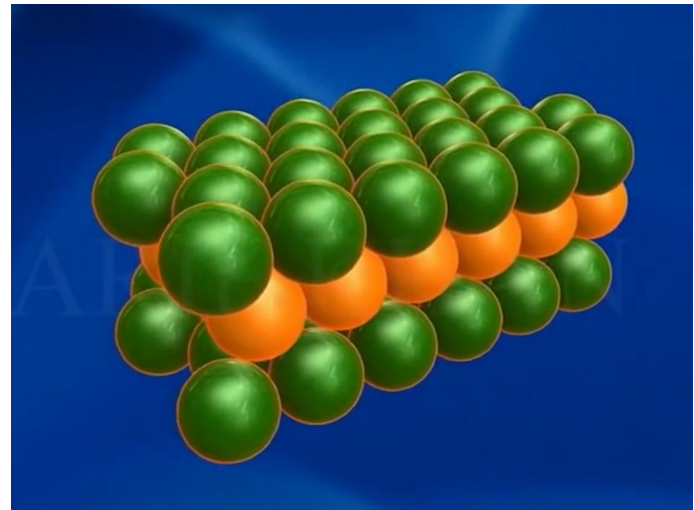
(a)



(b)



(c)



**ANALOGIJA: PRIMERJAVA GOSTE fcc KUBIČNE
ter GOSTE HEKSAGONALNE MREŽE**

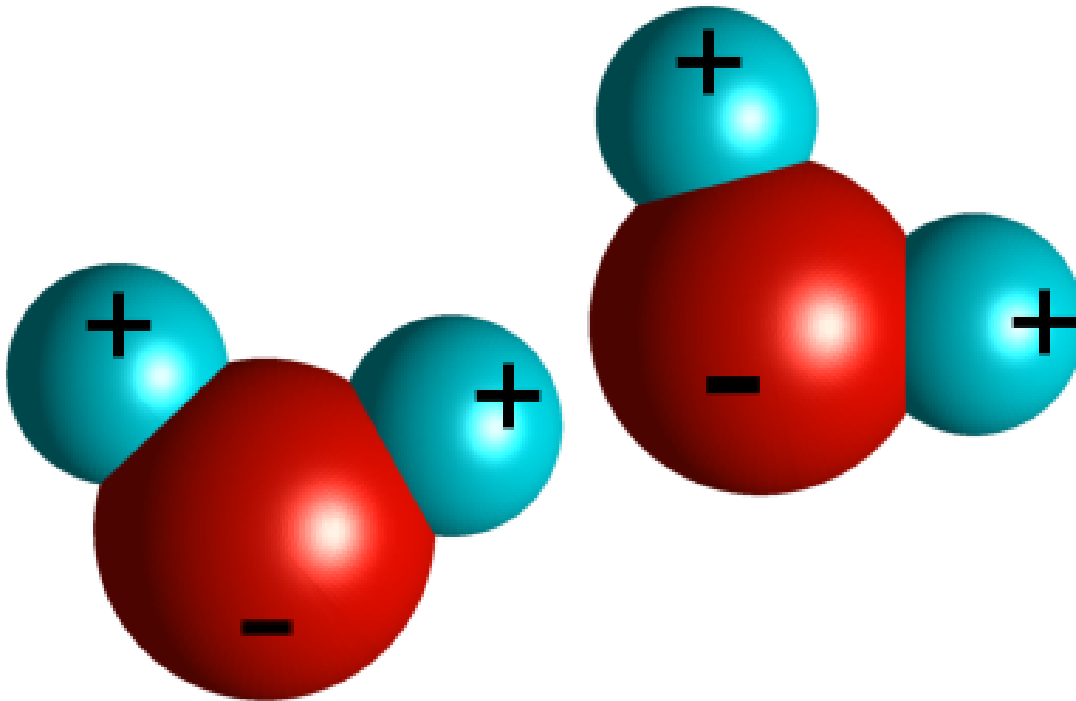
4. SPECIFIČNA TOPLOTA

Voda ima od vseh snovi, ki jih srečamo, največjo specifično toploto, $9 k_B$ na molekulo, ker se pri višanju temperature porabi veliko energije za razdiranje obročev. Zato je vodovje odličen toplotni rezervoar, ki blaži klimo.

Za primerjavo naj spomnimo, da je specifična toplota c_V na molekulo za enoatomni plin $\frac{3}{2}k_B$, za dvoatomni plin $\frac{5}{2}k_B$ ter za večatomni plin in večino tekočin in trdnih snovi približno $3k_B$.

5. DIELEKTRIČNA KONSTANTA

Zaradi kota med vodikoma imajo vodne molekule velik električni dipolni moment in posledično izredno veliko dielektrično konstanto $\epsilon = 80$. Zato je voda odlično topilo za soli, saj je sila med pozitivnim in negativnim ionom 80-krat zmanjšana in se zlahka ločita.



6. VODA KOT TOPILO

Zaradi kota med vodikoma imajo vodne molekule velik električni dipolni moment $p \sim 0,2e_0 \text{ nm}$ in posledično izredno veliko dielektrično konstanto $\epsilon = 80$. Zato je voda odlično topilo za soli, saj je sila med pozitivnim in negativnim ionom 80-krat zmanjšana in se zlahka ločita.

Voda je tudi sicer odlično topilo, ker je med obroči dosti praznega prostora in se lahko mnoge molekule "skrijejo". Pomislimo, da v litru vode raztopimo kilogram soli ali sladkorja, pa se prostornina komaj kaj poveča.

$$(D - \epsilon_0 E)\mathcal{V} = (\epsilon - 1)\epsilon_0 E\mathcal{V} = \frac{p_e E}{3k_B T} p_e,$$

$$(\epsilon - 1) \sim \frac{(ea)^2}{3k_B T \epsilon_0} \frac{1}{(2a)^3} \sim \frac{4\pi \text{ eV}}{3 \times 0,03\text{eV} \times 8} \sim 50.$$

Upoštevali smo:

$$p_e \sim ea, \quad \mathcal{V} \sim (2a)^3 \quad e^2/4\pi\epsilon_0 a \sim 1 \text{ eV}, \quad k_B T \approx 0,03 \text{ eV}.$$

7. DODATEK: KURJENJE

Malo znano je dejstvo, da je kurivo pravzaprav kisik, ogljik, vodik in ogljikovodiki mu le nudijo priložnost za sproščanje energije.

Razlog je v tem, da ima molekula O_2 dosti šibkejšo kovalentno vez (~ 2 eV na vez) kot ostale spojine (~ 4 eV na vez). Ker se pri nasičenih spojinah število vezi ohranja, to pomeni, da se obe vezi med kisikoma nadomestita z močnejšimi vezmi in se za vsako tako vez sprosti ~ 2 eV energije.

Pri gorenju metana $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ se na primer spremenijo 4 vezi in se sprosti $\sim 4 \times 2eV = 8eV$.

O=O	H-H	C-C	C=C	C-O	C=O	H-O	S=O
2,6	4,5	3,6	3,2	3,2	3,9	4,8	2,8

Table 1: Vezavna energija na vez [eV]