

Souhrn

Voda je nejdůležitější kapalinou na Zemi, ale přes nesmírné úsilí jsme jí ještě zcela neporozuměli. U vody byla potvrzena řada termodynamických anomálií (např. maximum hustoty při 4°C) a jejich výskyt byl intuitivně dán do souvislosti se silnou mezimolekulární asociativní silou, tj. vodíkovou vazbou. Nicméně, dosud nebyla zformulována rigorózní molekulární teorie.

Předkládaná práce se snaží navrhnout a aplikovat rigorózní statisticko-mechanický přístup k vodě. Tento přístup je založen na nedávných poznatcích, že struktura asociativních tekutin je určena především krátkodosahovými silami (jak odpudivými, tak přitažlivými). Tato skutečnost nám umožňuje aplikovat poruchovou teorii a použít krátkodosahový model jako referenci. Vlastnosti krátkodosahového referenčního modelu jsou poté odhadnuty pomocí jednoduchého, tzv. primitivního, modelu. Primitivní modely se analyticky konstruují tak, aby reprodukovaly struktury krátkodosahového referenčního modelu a přitom zachovaly jednoduchost interakcí dostatečnou k teoretickému popisu. Příspěvek primitivního modelu vyjádřený Wertheimovou TPT2 je použit jako referenční člen v poruchovém rozvoji. Stavová rovnice se potom doplní o disperzní a dipól-dipólový korekční člen.

Hlavní výsledky práce jsou následující: (i) Je vyšetřováno chování jednoduché stavové rovnice založené na primitivním referenčním členu. Ukazuje se, že taková rovnice je v principu schopna popsat několik anomálií, jmenovitě maximum hustoty, minimum izobarické tepelné kapacity a minimum izotermické stlačitelnosti. Rovnice je poté fitována na RKP data TIP4P vody s dobrou předpovědí teploty maxima hustoty. (ii) Je navržena vylepšená verze referenčního modelu, která vykazuje výše uvedené anomálie, aniž by byly potřeba korekce. (iii) Za účelem kvantifikovat dipól-dipólový korekční člen byly provedeny simulace MC a navržena teorie pro modifikované dipolární tuhé koule. Teorie selhává v popisu simulačních dat kvůli nástupu ferroelektrického přechodu.

Klíčová slova: Voda; Anomálie; Stavová rovnice; Poruchová teorie; Primitivní model; Dipolární tuhá koule.