

Woda i węgiel w przyrodzie oraz ich konfiguracja geometryczna

Krzysztof Kabat ¹

1. Wstęp

Nauki przyrodnicze zajmujące się badaniem różnych aspektów świata materialnego, w tym ożywionego oraz nieożywionego, obok właściwej sobie metodologii w zakresie prowadzonych badań i obserwacji do opisu tzw. *praw natury*, wykorzystują szeroko rozumiany aparat matematyczny, a współcześnie coraz częściej także aparat informatyczny. Już za czasów Arystotelesa (384 - 324 p.n.e), ówczesni badacze poszukiwali wspólnej płaszczyzny do opisywania odkrywanych przez siebie zjawisk i mechanizmów przyrodniczych, a tym samym komunikacji interdyscyplinarnej pomiędzy różnymi dziedzinami wiedzy. Można zatem przyjąć, że matematyka była, jest i bez wątpienia pozostanie powszechnym i niezbędnym narzędziem do opisywania zjawisk natury i to nie tylko w zakresie komunikacji pomiędzy tymi dziedzinami nauki, jakie wchodzi w zakres przyrody, ale też w sferze, w której odgrywa rolę spoiwa scalającego te pozornie różne i oddalone od siebie dyscypliny naukowe.

Opis zjawisk, praw i mechanizmów zachodzących w przyrodzie, w aspekcie matematycznym, realizuje się na wielu płaszczyznach jej zastosowań i nie ogranicza li tylko do wykorzystywania różnego rodzaju równań matematycznych, takich jak równania różniczkowe, czy rachunek całkowy. Stosuje się tu również rachunek liczb zespolonych, funkcje, czy analizę statystyczną, która zajmuje się wydobywaniem użytecznych informacji „ukrytych” w zbiorach wyników. Ponadto wiele zjawisk przyrodniczych opisywanych jest z wykorzystaniem własności figur geometrycznych, a w szczególności ich symetrii, a także niektórych własności brył przestrzennych. Natomiast w aspekcie informatycznym, do opisu przyrody, wykorzystuje się dostępne technologie multimedialne, za pomocą których tworzy się wizualizację nawet bar-

¹ Wydział Chemii UG, Katedra Chemii Analitycznej.

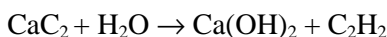
dzo złożonych zjawisk przyrodniczych, co w znacznym stopniu nie tylko uatrakcyjnia przekaz poznawanej wiedzy, ale czyni go bardziej zrozumiałym z punktu widzenia jej transponowania.

Wymiana wiedzy między poszczególnymi dziedzinami naukowymi, takimi jak: chemia, biologia, fizyka, medycyna, astronomia czy geografia, opisywane zunifikowanymi (ujednoliconymi) parametrami matematyczno-informatycznymi, odbywa się przez systemy edukacyjne zarówno w poziomym układzie edukacyjnym, który odnosi się do współcześnie żyjących pokoleń, jak również w układzie pionowym, który obejmuje przekazywanie skondensowanej wiedzy przyszłym pokoleniom.

Prezentowana praca przedstawia aspekty matematyczno-informatyczne komunikacji w przyrodzie na przykładzie dwóch komponentów, tj. węgla i wody, które są nierozzerwalnie związane z rozwojem życia na Ziemi.

2. Węgiel i jego odmiany alotropowe

Węgiel (*Carbon*) jest najbardziej rozpowszechnionym pierwiastkiem w przyrodzie, gdzie występuje zarówno w stanie wolnym, jak i w postaci związków chemicznych. Spotykamy go w litosferze, hydrosferze i atmosferze. Pierwiastek ten znajduje się zarówno w świecie mineralnym, jak i w organizmach żywych, a w przyrodzie nieożywionej przede wszystkim w postaci węglanów takich, jak: kalcyt, dolomit, magnezyt, czy syderyt oraz dwutlenku węgla CO_2 . Węgiel należy do czwartej grupy układu okresowego, zwanej węglowcami. Liczba atomowa węgla wynosi 6, natomiast jego liczba masowa (masa atomowa) równa jest 12,011. Pierwiastek ten jest niemetalem, a w związkach chemicznych występuje na -IV, +II i +IV stopniu utlenienia. Węgiel jest nierozpuszczalny w wodzie, zasadach oraz kwasach oraz jest mało aktywny pod względem chemicznym. W temperaturze pokojowej ulega reakcji jedynie z fluorem, natomiast w podwyższonej temperaturze łączy się z siarką dając siarczek węgla CS_2 , i tlenem tworząc tlenek węgla CO i dwutlenek węgla CO_2 . W wysokich temperaturach węgiel ulega reakcjom z wodorem oraz z metalami, dając węgliki, np. węgiel wapnia CaC_2 . Na skutek działania kwasów i wody węgliki ulegają rozkładowi, np.:

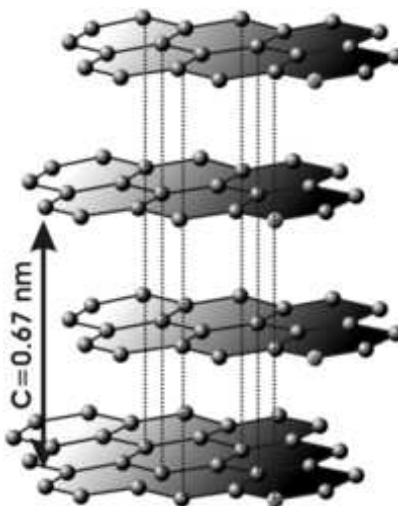


Liczba znanych związków węgla, zarówno tych które występują w przyrodzie oraz tych otrzymanych sztucznie, przewyższa liczbę związków wszystkich innych pierwiastków (z wyjątkiem związków wodoru). Tak duże bogactwo istniejących związków węgla wynika z dwóch ważnych właściwości tego pierwiastka, które odróżniają go od innych węglowców. Węgiel ma zdolność do tworzenia prostych, rozgałęzionych lub zamkniętych w pierścienie łańcuchów, które są bardzo trwałe na skutek wysokiej energii wiązania C-C. Drugą cechą wyróżniającą węgiel, jest możliwość tworzenia między jego atomami wiązań podwójnych i potrójnych.

Węgiel występuje w kilku odmianach *alotropowych*, które posiadają odmienne właściwości fizyczne i chemiczne oraz różnią się budową krystaliczną. Alotropia jest zjawiskiem polegającym na występowaniu dwóch lub więcej odmian tego samego pierwiastka, które posiadają odmienne właściwości fizykochemiczne, a także różną budowę krystaliczną lub posiadają różne ilości tych samych atomów w cząsteczce. Węgiel tworzy trzy odmiany alotropowe, do których należą *grafit*, *diaament* i *fullereny*. Sadza, która dawniej niesłusznie była uważana za odmianę alotropową węgla to drobnokrystaliczny grafit.

2.1 Grafit

Grafit to odmiana alotropowa węgla, która występuje także w postaci minerału. Jest on ciemnoszarym ciałem stałym, tłustym w dotyku o słabym metalicznym połysku. Grafit jest bardzo miękki, a jego twardość w skali Mohsa wynosi 1. Ponadto grafit dobrze przewodzi elektryczność i ciepło. Jego gęstość wynosi 2,1-2,3 g/cm³. Struktura grafitu (Rys.1), składa się z równoległych warstw, w których występują sprzężone, sześcioczłonowe aromatyczne układy cykliczne, podobne do benzenu. Każde wiązanie C-C w pojedynczej warstwie struktury grafitu ma charakter wiązania aromatycznego. Wiązania te



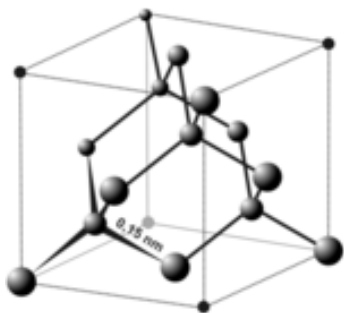
Rys.1 Budowa krystaliczna grafitu.

tworzą obszary które, podobnie jak w metalach, umożliwiają swobodny ruch elektronów równoległe do warstw, dzięki czemu grafit wykazuje stosunkowo wysokie przewodnictwo elektryczne. Długość wiązania między atomami węgla wynosi $1,42 \text{ \AA}$ ($0,142 \text{ nm}$), między warstwami $3,35 \text{ \AA}$ ($0,335 \text{ nm}$), a kąt między wiązaniami węgla wynosi 120° . Ponadto pomiędzy poszczególnymi warstwami grafitu występują jedynie słabe oddziaływania elektrostatyczne Van der Waalsa.

Grafit ze względu na swoją odporność w zakresie wysokich temperatur, jest wykorzystywany w produkcji tygli, które stosuje się do topienia metali. Ponadto grafit ma swoje zastosowanie w produkcji ołówków oraz farb antykorozyjnych, a ze względu na dobre przewodnictwo elektryczne używa się go również do wyrobu elektrod dla przemysłu elektrochemicznego i elektrometalurgicznego. Ta odmiana węgla bywa też wykorzystywana jako smar do mechanizmów pracujących w podwyższonych temperaturach, a także stosuje się go jako moderator w reaktorach jądrowych.

2.2 Diament

Diament jest najcenniejszym i najtwardszym kamieniem szlachetnym. Już od starożytności był znany w Azji, a w XII wieku na dobre zagościł w Europie. W stanie czystym tworzy bezbarwne bardzo twarde (10 w skali Mohsa) przezroczyste kryształy o regularnej strukturze, które silnie załamują światło i nie przewodzą prądu elektrycznego. Ich gęstość wynosi $3,5 \text{ g/cm}^3$. Zanieczyszczenia diamentu powodują, że przybiera on różne barwy. W zależności od ilości i rodzaju tych domieszek kryształy diamentu mogą być zabarwione na czerwono, żółto, niebiesko lub brunatno. Spotykane są także czarne diamenty (karbonado).



Rys.2 Struktura diamentu.

W sieci przestrzennej diamentu (Rys.2), każdy atom węgla jest otoczony przez 4 inne atomy, których środki ciężkości wyznaczają czworościan foremny. Wszystkie wiązania chemiczne w tej sieci są wiązaniami kowalencyjnymi, tj. wiązania utworzone poprzez uwspólnienie elektronów, i mają tę samą długość, która wynosi $1,54 \text{ \AA}$ ($0,154 \text{ nm}$).

Diament jest mało aktywną chemicznie substancją nawet w wy-

sokiej temperaturze. W powietrzu spala się powoli dopiero powyżej 1100 K. Nie reaguje z kwasami i zasadami, natomiast ulega działaniu silnej saletry i stopionego węglanu sodu. Na skutek ogrzewania diamentu bez dostępu powietrza otrzymujemy grafit.

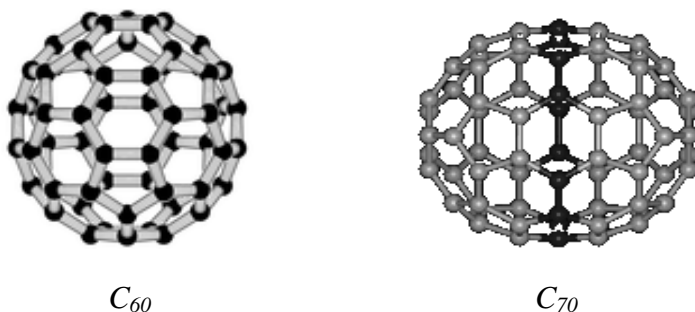
Diament znalazł zastosowanie m.in. w jubilerstwie, wiertnictwie, produkcji materiałów ściernych oraz narzędzi tnących. Oszlifowane diamenty, zwane brylantami, uważane są za najpiękniejsze kamienie szlachetne. Okazy diamentów nadające się do celów jubilerskich spotyka się jednak bardzo rzadko, a przeważająca część diamentów wykorzystywana jest w celach technicznych.

2.3 Fullereny

Fullereny to najpóźniej odkryta odmiana alotropowa węgla. Dokonali tego w 1985r. Robert Curl, Richard Smalley oraz Herold Kroto, którzy w 1996r. otrzymali za swoje osiągnięcie Nagrodę Nobla.

W naturalnym środowisku fullereny można spotkać w szungicie (minerał węgla kopalnego) oraz w strzałkach piorunowych – tworach powstałych w miejscu uderzenia pioruna w ziemię. Przypuszcza się też, że mogą występować także w pyłach kosmicznych wokół wygasających gwiazd. Natomiast, aby sztucznie wytworzyć fullereny, należy wybić laserem atomy węgla z grafitu. Proces ten zachodzi w próżni w temperaturze bliskiej zera bezwzględnego, tj. $-273,15\text{ }^{\circ}\text{C}$ w atmosferze helu. Fullereny mogą być również wyodrębnione z sadzy, przy użyciu benzenu lub innego rozpuszczalnika organicznego.

Strukturalnie fullereny są zbudowane z bardzo dużej ilości atomów węgla, których liczba jest zawsze parzysta. Cząsteczki te, składają się z pierścieni pięcio- i sześćoatomowych, tworzących zamkniętą strukturę kopuł geodetycznych. Konstruktorem tych struktur był Richard Buckminster Fuller (1895-1983), i stąd pochodzi nazwa tych cząsteczek.

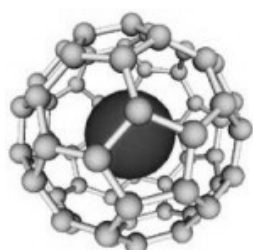
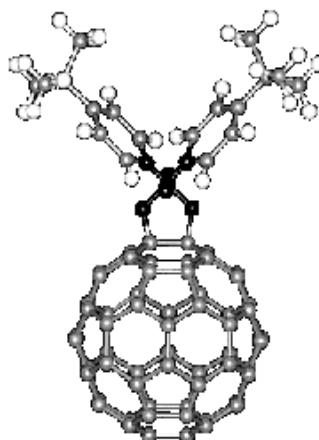


Rys.3 Budowa najpowszechniejszych i najtrwalszych fullerenów C_{60} i C_{70} .

Fullereny występują w postaci miękkich, żółtych lub brązowych kryształków. Na Rys.3 przedstawiono najczęściej spotykane formy tych cząsteczek, które mają kształt kulisty (fulleren C_{60}) lub elipsoidalny (fulleren C_{70}). Cząsteczki te łatwo sublimują oraz są dobrze rozpuszczalne w roztworach organicznych, ale nie rozpuszczają się w wodzie.

Fullereny ze względu na sposób łączenia się z innymi pierwiastkami lub cząsteczkami dzieli się na trzy rodzaje (Rys.4):

- fullereny *egzohedralne* – to fullereny, do których przyłączyły się „od zewnątrz” obce atomy,
- fullereny *endohedralne* – to fullereny, wewnątrz których został „uwięziony” obcy atom,
- *heterofullereny* – to fullereny, w których nastąpiła częściowa, lub całkowita substytucja (zastąpienie) atomów węgla, przez atomy innych pierwiastków.

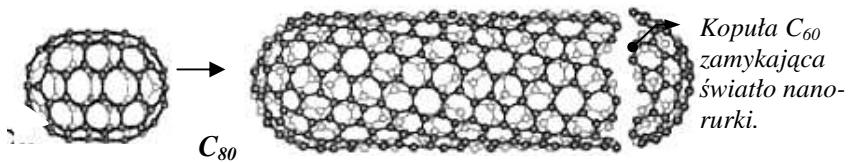
*fulleren**heterofulleren**fulleren**endohedralny**egzohedralny*

Rys.4 Rodzaje fullerenów.

Fullereny mają szerokie spektrum zastosowań, a w szczególności wykorzystuje się je w medycynie. Są one antyoksydantami, tzn. pochłaniają i dezynfekują wolne rodniki odpowiedzialne za powodowanie sklerozy, chorobę Parkinsona i przyspieszanie procesu starzenia się. Udowodniono też, że fulleren C_{60} spowalnia obumieranie komórek nerwowych mózgu, a liposomowa pochodna tego związku, działa destrukcyjnie na komórki rakowe, uszkodzając ich aminokwasy. Na uwagę zasługuje też fakt, że jeśli wewnątrz C_{60} umieści się pierwiastek promieniotwórczy, to powstanie radionuklid (radiofarmaceutyk) przydatny w diagnostyce medycznej, co umożliwia badanie organizmu. Fullereny mają też szansę zostać półprzewodnikami. Specyficzne związki fullerenów, tj. fullerydy, mogą przewodzić prąd poniżej temperatury krytycznej. Wykazano też, że gdy fullereny są obecne w polimerach drukarek i kopiarek, znacznie polepsza to jakość i trwałość wydruków. Fullereny stosuje się także w:

- lotnictwie, gdzie stosowane są w stabilizatorach paliw samolotowych wyłapując wolne rodniki, co ułatwia swobodny przepływ paliwa,
- ulepszeniu jakości aluminium do zwiększania jego twardości,
- produkcji diamentów, gdyż pod wpływem wysokiego ciśnienia zmieniają one swoją strukturę, zamieniając się w diament.

2.3.1 Nanorurki węglowe (CNT – Carbon nanotube)



Rys.5 Nanorurka powstająca z modyfikacji fullereny – C_{80} z lewostronnym skretem 30° .

Podczas syntezy fullerenów w 1991 r., odkryto liczne obiekty włókniste, które okazały się być rurkami węglowymi. Ponadto dowiedziono, że nanorurki to struktury powstające na bazie fullerenów. Średnica nanorurek waha się od 1,2 nm do 2,0 nm dla rurek jednościennej (jednowarstwowych – SWNT) oraz do 25 nm dla rurek wielościennej (wielowarstwowych – MWNT), a jej długość wynosi ok. 1 mm. Nanorurki swym kształtem przypominają tubę, czyli pusty walec. Są to więc długie walcowate twory uzyskiwane ze zwinięcia sześciokątnej płaszczyzny grafitowej (Rys. 5), które mogą być obustronnie domknięte kopułami (półkulami) C_{60} .

Najkrótszą nanorurką jest C_{70} , najdłuższe zaś, które odkryto w 2003 r., mają ponad 100 metrów długości.

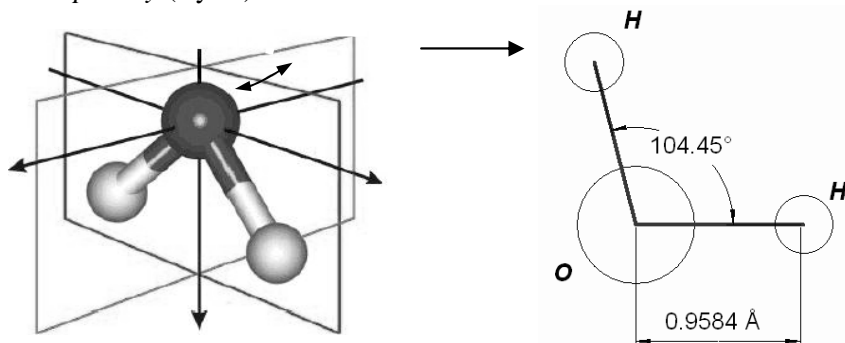
Z kształtu nanorurek wynikają bardzo ciekawe właściwości. Są one nie tylko bardzo wytrzymałe, ale też wykazują dużą elastyczność oraz duże przewodnictwo cieplne i są wykorzystywane w przemyśle elektronicznym.

Nanorurki cechuje szereg właściwości, które decydują o ich szerokim zastosowaniu w tzw. nanotechnologiach. Na uwagę zasługuje fakt, że są one najwytrzymalszym i najsztwniejszym znanym materiałem wytworzonym przez człowieka, a ich wytrzymałość, np. na rozciąganie sięga 63 GPa, gdzie dla porównania, hartowana stal osiąga wytrzymałość rzędu 1,2 GPa. Nanorurki wykazują też dużą odporność na ścieranie, doskonale przewodzą ciepło wzdłuż swoich struktur oraz wytrzymują temperatury do 2800 °C w próżni i do około 750 °C w warunkach normalnych. Ponadto w zależności od ułożenia linii wiązań wzdłuż albo w poprzek, nanorurki mogą być dobrymi przewodnikami lub półprzewodnikami. Badania wykazały, że nanorurki mogą przewodzić prąd o 1000-krotnie większym natężeniu niż kable metalowe o analogicznej masie.

3. Woda i jej stany skupienia

Woda jest najbardziej rozpowszechnionym związkiem chemicznym w przyrodzie, a jej ilość szacuje się na ok. $2,2 \cdot 10^{18}$ ton. Uważa się, że woda jest najważniejszą molekułą chemiczną występującą na Ziemi ponieważ bez wody nie byłoby możliwe życie na naszej planecie. Fizycznie woda jest bezbarwną i bezwoną cieczą pozbawioną smaku.

Woda, czyli tlenek wodoru jest związkiem tlenu O i wodoru H, o wzorze chemicznym H_2O . Budowa cząsteczki wody wykazuje charakter *dipolowy* (Rys.6).



Rys.6 Budowa cząsteczki wody: O – atom tlenu, H – atom wodoru; ładunki cząstkowe – δ^+ , δ^- .

Wyznaczona doświadczalnie wartość kąta między wiązaniami O-H (wiązanie kowalencyjne spolaryzowane) wynosi $104,5^\circ$. Dzieje się tak ponieważ bardziej elektroujemny atom tlenu ma większą zdolność do przyciągania elektronów niż wodór, co powoduje przesunięcie ładunku ujemnego w kierunku atomu tlenu. Ta asymetria sprawia, że jedna strona cząsteczki wody wykazuje względny ładunek dodatni na atomach wodoru (δ^+), a druga strona tej cząsteczki wykazuje względny ładunek ujemny na atomie tlenu (δ^-).

Woda w przyrodzie występuje w trzech stanach skupienia. Najczęściej spotykanym jej stanem jest ciecz, która powstaje przez schładzanie pary wodnej (skraplanie) lub ogrzewanie lodu (topnienie) i przyjmuje temperaturę T w zakresie: $0^\circ\text{C} < T < 100^\circ\text{C}$. W procesie krzepnięcia lub resublimacji woda przechodzi w stan ciała stałego, która ma temperaturę $T < 0^\circ\text{C}$. Z kolei w procesie sublimacji, parowania lub w temperaturze powyżej temperatury wrzenia, tj. dla $T > 100^\circ\text{C}$, woda przyjmuje postać pary wodnej.

Jednym z bardziej interesujących zjawisk dotyczących wody są jej anomalie rozszerzalności cieplnej. Typowymi zjawiskami związanymi z wymianą ciepła z otoczeniem są zmiany rozmiarów i stanu skupienia ciał. Objętość prawie wszystkich ciał z małymi wyjątkami zmienia się liniowo wraz z temperaturą zgodnie z równaniem:

$$V = V_0 \cdot (1 + T\beta)$$

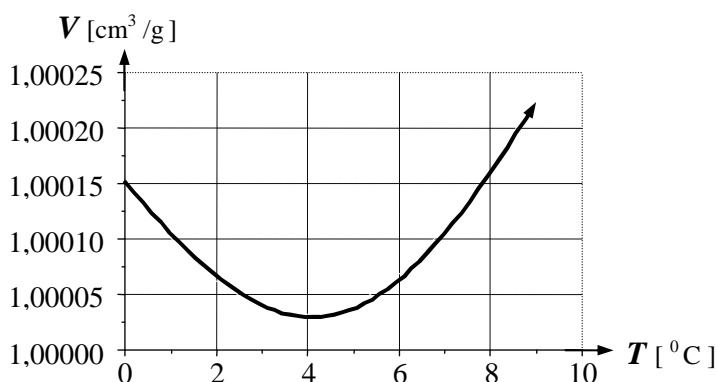
gdzie:

V - objętość ciała w danej tem. T [$^\circ\text{C}$]

V_0 - objętość ciała w tem. 0°C ,

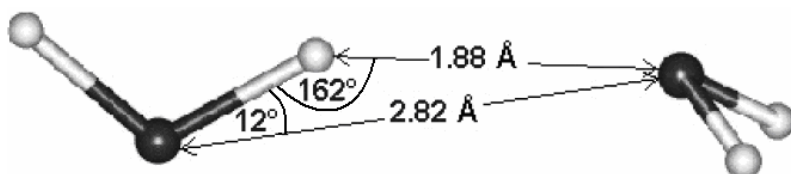
β - współczynnik rozszerzalności objętościowej (zależy od rodzaju i stanu skupienia ciała).

Okazuje się jednak, że najpopularniejsza z cieczy – woda, zachowuje się zupełnie odmiennie pod tym względem. Zależność zmiany objętości wody od jej temperatury przedstawia Rys.7. Zauważmy, że powyżej 4°C objętość wody rośnie wraz ze wzrostem temperatury podobnie jak dzieje się to dla większości ciał, natomiast w zakresie temperatur od 0°C do 4°C objętość wody zamiast rosnać, maleje wraz ze wzrostem jej temperatury. Ponadto w temperaturze równej 4°C woda (H_2O) zajmuje najmniejszą objętość.



Rys.7 Zależność objętości 1 grama wody od temperatury;
 V – objętość właściwa, T – temperatura.

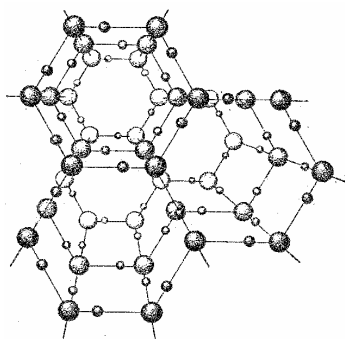
Za te szczególne właściwości wody w zakresie temperatur od 0 °C do 4 °C odpowiadają tzw. *wiązania wodorowe*, które są oddziaływaniami elektrostatycznymi pomiędzy tlenem O pochodzącym z jednej molekuly wody, a wodorem H pochodzącym z drugiej molekuly, i które powstają w momencie łączenia się dipolowych cząsteczek między sobą z utworzeniem dimeru $(\text{H}_2\text{O})_2$ (Rys. 8).



Rys.8 Dimer $(\text{H}_2\text{O})_2$ – dwie molekuly wody połączone wiązaniem wodorowym o długości 1.88 Å.

Obniżając temperaturę wody od 4 °C do 0 °C obserwujemy anomalny wzrost jej objętości (Rys. 7). Dzieje się tak, dlatego, że poniżej 4 °C cząsteczki wody zaczynają intensywnie asocjować, tj. tworzą agregaty, w wyniku czego w temperaturze 0 °C tworzy się heksagonalna struktura lodu z dużymi otwartymi przestrzeniami między ściankami kryształu (Rys. 9). Powstała struktura lodu daleka jest od struktury gęstego upakowania. Każdy atom tlenu ma czterech bezpośrednich sąsiadów. W konsekwencji zamarzająca woda zwiększa swoją objętość o ok.

10% względem fazy ciekłej, a powstające kryształki lodu odznaczają się dużą kruchością.



Rys.9 Model kryształu lodu.

Odwrotnie jest podczas topnienia lodu. Wiązania wodorowe pękają a odległości między najbliższymi sąsiadami rosną. Dzięki ruchowi cząsteczek ich upakowanie staje się ciaśniejsze i w rezultacie objętość wody maleje. Niezależnie od obecności kryształków lodu, wraz ze wzrostem temperatury w wyniku wzrostu ruchu cieplnego cząsteczek objętość wody rośnie. Nałożenie się tych dwóch procesów prowadzi w konsekwencji do

anomalnego zachowania się wody. W temperaturze 4 °C woda osiąga największą gęstość. Ma to doniosłe znaczenie dla utrzymania życia organicznego w wodzie w czasie zimy. Woda w zbiornikach naturalnych chłodzi się od powierzchni. Po osiągnięciu temperatury 4 °C dalsze jej obniżanie powoduje, że woda o tej temperaturze, jako mająca największą gęstość, czyli najcięższa, opadnie na dno zbiornika wodnego, a woda chłodniejsza o mniejszej gęstości wypłynie na powierzchnię. Proces ten trwa aż do osiągnięcia temperatury 0 °C, kiedy woda zaczyna zamarzać. Wówczas lód, który ma gęstość jeszcze mniejszą niż woda ($d \cong 0,9 \text{ g/cm}^3$) utrzymuje się z łatwością na jej powierzchni.

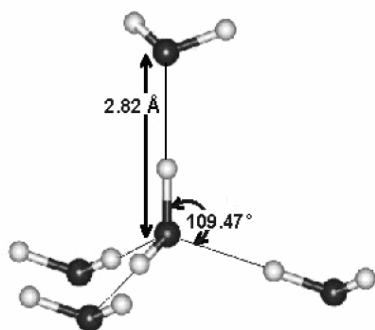
3.1 Klastermy

Wspomniane już wiązania wodorowe odpowiedzialne są za tworzenie się agregatów cząsteczek wody zwanych *klasterami*. Jony klasterów wody, a dokładnie uwodnione protony typu $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, po raz pierwszy zostały zarejestrowane w warstwie D jonosfery przez R. S. Narcisi w 1965 r. Prawdopodobnym mechanizmem powstawania klasterów wody w górnych warstwach atmosfery jest proces jej *dysocjacji* na jony H^+ i OH^- pod wpływem promieniowania kosmicznego, a następnie *asocjacji* (łączenia się) protonu z innymi cząsteczkami wody. Uwodnione protony mogą także występować w wodzie w stanie ciekłym, co wykazał niemiecki chemik Manfred Eigen. Ponieważ woda może ulegać w niewielkim stopniu dysocjacji na jony H^+ i OH^- , naturalnym procesem jest przyłączanie do protonów neutralnych molekuł wody.

Klaster wody wykazują ciekawe właściwości. W badaniach spektrometrii mas okazało się, że niektóre struktury klastrów wody są liczniejsze od pozostałych. I tak dla małych klastrów największą liczebność mają jony $H^+(H_2O)_4$, natomiast dla większych szczególnie wyróżniają się jony $H^+(H_2O)_{21}$.

3.1.1 Struktura ciekłej wody

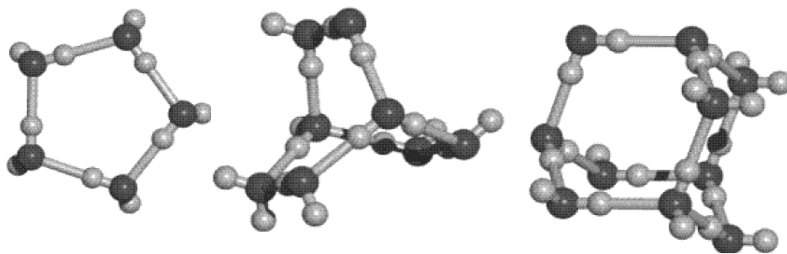
Wiele zagadkowych właściwości wody wynika z faktu, że jej cząsteczki tworzą nieskończoną sieć połączoną wiązaniami wodorowymi, zawierającą klaster o dobrze określonej strukturze. Na przykład w niższych temperaturach tworzą się struktury o niższej gęstości, z dużą ilością wiązań



Rys.10 Model klastera pentameru wody (H_2O)₅ o budowie tetraedru.

wodorowych, o wysokim stopniu uporządkowania, a w wyższych temperaturach przeważają oddziaływania niewiążące, powodując stopniowy rozpad klastrów. Stąd wiązania wodorowe – z natury łączące cząsteczki wody – utrzymują je w większej odległości, niż oddziaływania niewiążące. W temperaturze pokojowej 80% cząsteczek wody tworzy jedno silne wiązanie wodorowe ze swoją grupą – OH oraz jedno słabsze wiązanie wodorowe z grupą – OH z innej cząsteczki, co prowadzi do powstania pentamerów (H_2O)₅. Pozostałe 20% cząsteczek wody uczestniczy w tetraedrycznie koordynowanych czterech wiązaniach wodorowych (Rys. 10). Cząsteczki wody otoczone przez cztery wiązania wodorowe wykazują silne tendencje do łączenia się z innymi molekułami wody, tzn. do tworzenia klastrów.

Wiele zagadkowych właściwości wody wynika z faktu, że jej cząsteczki tworzą nieskończoną sieć połączoną wiązaniami wodorowymi, zawierającą klaster o dobrze określonej strukturze. Na przykład w niższych temperaturach tworzą się struktury o niższej gęstości, z dużą ilością wiązań wodorowych, o wysokim stopniu uporządkowania, a w wyższych temperaturach przeważają oddziaływania niewiążące, powodując stopniowy rozpad klastrów. Stąd wiązania wodorowe – z natury łączące cząsteczki wody – utrzymują je w większej odległości, niż oddziaływania niewiążące. W temperaturze pokojowej 80% cząsteczek wody tworzy jedno silne wiązanie wodorowe ze swoją grupą – OH oraz jedno



Rys.11 Cykliczny pentamer, dwucyklo-oktamer, tricyklo-dekamer.

Na powyższej rycinie (Rys. 11), pokazano trzy małe klaster, odpowiednio: cykliczny pentamer, dwucyklo-oktamer oraz tricyklo-dekamer, które są stosunkowo stabilne, a ich wzajemne oddziaływania prowadzą do powstawania większych klasterów o symetrii ikosaedru (dwudziestościan foremny).

3.2 Fraktale

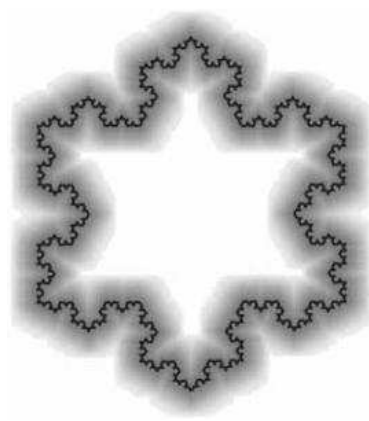
Fraktale w znaczeniu potocznym to obiekty samopodobne, tzn. takie, których części są podobne do całości. Po raz pierwszy otrzymał je w 1980 roku Benoit Mandelbrot, który badając numerycznie pewne wielomiany zespolone otrzymał interesujące wykresy. Analizując je wysnuł przypuszczenie, że geometria euklidesowa nie nadaje się do opisu otrzymanych kształtów. Z uwagi na bardzo dużą różnorodność fraktali, współcześnie matematycy unikają podawania ich ścisłej definicji i proponują określać je jako zbiór, który posiada następujące charakterystyki:

- nie daje się łatwo opisać w języku tradycyjnej geometrii euklidesowej,
- jest samo-podobny, jeśli nie w sensie dokładnym, to przybliżonym lub stochastycznym,
- jego wymiar Hausdorffa, tj. liczba opisująca dany zbiór w przestrzeni metrycznej, jest większy niż jego wymiar topologiczny,
- ma względnie prostą definicję rekurencyjną oraz naturalny (poszarpany, kłębiasty) wygląd.

W przyrodzie spotykamy bardzo wiele obiektów, które można opisać za pomocą fraktali. Na przykład: kłębiastość chmur, budowa liścia paproci (Rys. 12), linia horyzontu łańcucha górskiego, przestrzenna struktura płatka śniegu (Rys. 13), zarys linii brzegowej, czy wzory na pancierzach zwierząt.



Rys.12 Liść paproci.



Rys.13 Płatek śniegu wygenerowany z krzywej Kocha.

Za jedną z cech charakteryzujących fraktal uważa się samopodobieństwo, tzn. podobieństwo fraktala do jego części. Co więcej, zbiory fraktalne mogą być samoafiniczne, tzn. część zbioru może być obrazem całości. Dla figur samopodobnych można określić wielkość zwaną wymiarem samopodobieństwa, który definiujemy jako logarytm o podstawie równej skali podobieństwa i liczbie logarytmowanej wskazującej, ile razy większa od figury wyjściowej (jaką częścią figury wyjściowej) jest figura podobna do niej w tej skali. Dla fraktali liczba ta może nie być całkowita. Na przykład *zbiór Cantora* jest podobny do swoich dwu części w skali 3, a *wymiar Hausdorffa zbioru Cantora* wynosi $d = \log 2 / \log 3 \approx 0,630929$, natomiast *trójkąt Sierpińskiego* jest podobny do swoich trzech części w skali 2, a jego *wymiar Hausdorffa* jest równy $d = \log 3 / \log 2 \approx 1,5849625$.

W strukturach fraktalnych odnajdujemy piękno przypadkowych kompozycji, a jednocześnie wysokie samopodobieństwo i symetrię. Być może cała przyroda ma strukturę fraktalną, a twory czysto geometryczne w ogóle nie istnieją i są jedynie stworzonymi przez ludzi uproszczeniami. Może to zatem tłumaczyć, że coraz częściej obserwuje się, iż w wielu dziedzinach nauki stosowany jest współcześnie opis fraktalny.

4. Podsumowanie

Świat w którym żyjemy to niezwykle złożony i wciąż nie odkryty ład, który nie tylko wciąż zachwyca nas swą niepowtarzalnością, ale dostarcza też wielu pomysłów i koncepcji poznawania otaczającej nas przyrody. Uznając fundamentalne znaczenie faktów empirycznych, należy pamiętać, że nie można zrozumieć przyrody, nie można przewidywać nowych zjawisk i skutków działania praktycznego, mając tylko – nawet bardzo dokładne – katalogi faktów. Przyrodę możemy zrozumieć jedynie za pomocą adekwatnych, syntetycznych teorii opisujących w jednolity sposób nieskończoną liczbę pozornie zupełnie odmiennych faktów, teorii uwypuklających głębokie związki zwane prawami natury. Nieodzownym jest więc nieustanne poszukiwanie takich mechanizmów, które nie tylko ujednoczą opis gromadzonych faktów, ale też pozwolą na coraz lepszą ich interpretację. Możliwości opisywania takich mechanizmów daje stosowanie aparatu matematyczno-informatycznego do zrozumienia praw zachodzących w przyrodzie.

Literatura

1. A. Huczko, *Fulereny. Nobel za węglowe piłeczki*. PWN Warszawa 2000.

2. A. Huczko, P. Byszewski, *Fulereny i nanorurki węglowe*. Wyd. UW, Wrocław 1998.
3. Collins P. G., Avouris P., *Świat Nauki* 2, 40, 2001.
4. Curl R. F., Kroto H. W., Smalley R. E., *Świat Nauki*, 3, 8, 1997.
5. <http://www.wiedzaizycie.pl/1997/97032000.htm>
6. <http://commons.wikimedia.org/wiki/Fullerene>"
7. <http://www.dami.pl/~chemia/liceum/liceum13/pierwiastki4.htm>
8. <http://www.nantero.com/>
9. <http://laser.phys.metro-u.ac.jp/metrotube.html>
10. M. Lancaster, F. Honda, Y. Fukuda, J.W. Rabelais, *J. Am. Chem. Soc.* 101 (1979) 1951.
11. Przygocki W., Włochowicz A., *Fulereny i nanorurki*, WNT, Warszawa, 2001.
12. R.S. Narcisi, A.D. Bailey, *J. Geophys. Res.* 70 (1965) 3787.
13. W. Śliwa, *Fulereny*. Wyd. WSP w Częstochowie, Częstochowa 1995/96.
14. Smalley R. E., *Postępy fizyki*, 48 (6), 523, 1997.

