

Оценим среднюю энергию связи молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  в кристалле льда, то есть энергию, необходимую, чтобы «выдернуть» молекулу из общей массы льда. Пусть  $d$  - среднее расстояние между молекулами в кристалле льда,  $m_0$  - масса молекулы воды. Количество молекул  $\text{H}_2\text{O}$  в 1 кг:

$$N = \frac{1\text{кг}}{m_0}$$

$$m_0 = 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot 18\text{кг} = 3 \cdot 10^{-26} \text{кг}$$

$$N \approx 3.3 \cdot 10^{25}$$

Зная плотность льда, можно оценить среднее расстояние между молекулами  $\text{H}_2\text{O}$ :

$$\rho = \frac{m_0}{d^3}$$

$$d \approx \sqrt[3]{\frac{m_0}{\rho}} \approx 3 \cdot 10^{-10} \text{м} = 0.3 \text{нм}$$

Изменение энергии связи молекулы при переходе из льда в воду можно оценить как

$$E_{12} = \frac{C_{\text{пл}} \cdot 1\text{кг}}{N} = C_{\text{пл}} \cdot m_0 \approx 10^{-20} \text{Дж}$$

Энергию связи молекулы воды можно оценить из энергии поверхностного натяжения (считая энергию связи молекулы в объёме жидкости в два раза большей чем на поверхности). Энергия связи молекулы воды (энергия необходимая для того, чтобы «вырвать» молекулу из воды) может быть оценена как

$$E_{23} = 2 \cdot \sigma \cdot S = 2 \cdot \sigma \cdot d^2 \approx 1.26 \cdot 10^{-20} \text{Дж} \approx 10^{-20} \text{Дж}$$

Таким образом, получим оценку общей энергии связи молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  в кристалле льда:

$$E_0 = E_{12} + E_{23} = 2 \cdot \sigma \cdot d^2 + C_{\text{пл}} \cdot m_0 \approx 2 \cdot 10^{-20} \text{Дж}$$

Рассмотрим теперь наночастицы льда радиусом  $R=50$  нм.

Для того, чтобы разбить 1 грамм льда на такие наночастицы, нужно затратить энергию, равную половине энергии связи молекул (найденную в предыдущем пункте), находящихся на поверхности наночастиц. Будем считать, что среднее расстояние между молекулами в жидком и твёрдом состояниях одинаково (для оценки величин различием можно пренебречь).

Количество наночастиц льда в 1 грамме:

$$N_0 = \frac{1\text{г} / \rho}{\frac{4}{3} \pi R^3} \approx 2 \cdot 10^{15}$$

Площадь поверхности одной наночастицы:

$$S = 4\pi R^2$$

Количество молекул, расположенных на поверхности одной наночастицы:

$$N = \frac{4\pi R^2}{d^2} \approx 3 \cdot 10^5$$

где  $d$  – среднее расстояние между молекулами, оцененное ранее.

Таким образом, общее число частиц, находящихся на поверхности, равно

$$N_{\text{total}} = N \cdot N_0 = 6 \cdot 10^{20}$$

а оценка для полной энергии, необходимой для разделения 1 грамма льда на наночастицы:

$$E_{nano} = \frac{1}{2} N_{total} \cdot E_0 \approx 6 \text{ Дж}$$

**Замечание:** В данной задаче необходимо **оценить** энергии на наноуровне, исходя из макроскопических параметров и значений. Поэтому существует несколько различных подходов к решению этой задачи. Например, можно оценить энергию связи молекул в кристалле льда как энергию, необходимую для того, чтобы перевести лёд из твёрдого состояния в пар. Отметим, что при таком подходе в оценку этой энергии войдёт также энергия, потраченная на увеличение кинетической энергии молекул пара.

Ниже приведён пример альтернативного решения задачи.

Возьмем 1 моль воды, он содержит  $N = 6 \cdot 10^{23}$  молекул  $\text{H}_2\text{O}$ , каждая из которых связана с четырьмя ближайшими соседями водородными связями. В одной связи участвуют две молекулы, поэтому общее число связей:  $N \cdot 4 / 2 = 2N$ .

Для разрушения всех связей переведем (мысленно) молекулы в газовую фазу. Теплота плавления льда – 6 кДж/моль, теплота испарения воды при  $0^\circ\text{C}$  – 44 кДж/моль. Отсюда находим оценку энергии одной связи:

$$E = \frac{Q_{пл} + Q_{исп}}{2N} = \frac{(6+44) \cdot 10^3}{2 \cdot 6 \cdot 10^{23}} = 4 \cdot 10^{-20} \text{ Дж.}$$

Оценка энергии, необходимой для «вырывания» молекулы из кристалла льда:  $\frac{8}{N} 8 \cdot 10^{-20}$  Дж.

Получившийся результат несколько превышает предыдущую оценку, так как в эту энергию включена также кинетическая энергия молекул пара. Попробуем учесть эту энергию. Для многоатомного газа кинетическая энергия:

$$E = 3kT = 1.5 \cdot 10^{-20} \text{ Дж,}$$

тогда итоговая энергия  $E = 6.5 \cdot 10^{-20}$  Дж, что уже ближе к предыдущей оценке.

2) Для разбиения льда на шарики необходимо разорвать часть связей между молекулами воды, а именно – между теми, которые находятся на поверхности (у каждой молекулы, находящейся на поверхности, останутся связи с внутренними молекулами). Будем считать, что у каждой поверхностной молекулы разорвалось две связи. Поскольку в одной связи участвуют две молекулы, то число разорванных связей равно числу молекул на поверхности.

Оценим долю молекул на поверхности наночастиц диаметром 100 нм. Диаметр молекулы воды во льду можно оценить через плотность:

$$d = \sqrt[3]{\frac{M}{\rho N}} = \sqrt[3]{\frac{18 \text{ г/моль}}{1 \text{ г/см}^3 \cdot 6 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}}} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0.3 \text{ нм}$$

Объем поверхностного слоя равен разности между объемом наночастицы  $\frac{\pi D^3}{6}$  и «внутренним объемом», соответствующим диаметру  $D - 2d$ . Доля частиц на поверхности равна отношению объема поверхностного слоя к объему наночастицы:

$$\frac{V_{пов}}{V_{нч}} = \frac{\frac{\pi D^3}{6} - \frac{\pi (D - 2d)^3}{6}}{\frac{\pi D^3}{6}} = 1 - \left(1 - \frac{2d}{D}\right)^3 \approx \frac{6d}{D} = 1.8 \cdot 10^{-2}$$

Энергия, необходимая для разбиения равна общему числу молекул в 1 г, умноженному на долю молекул на поверхности наночастицы и на энергию одной связи:

$$\left(\frac{1}{18} \cdot 6 \cdot 10^{23}\right) \cdot (1.8 \cdot 10^{-2}) \cdot (3.25 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}) \approx 19 \text{ Дж}$$