

КЛАСТЕРЫ В «ПРОСТЫХ» И «НОРМАЛЬНЫХ» ЖИДКОСТЯХ

Радченко А.К., Шахов А.В., Неручев Ю.А.*

КГУ, Курск, Россия

**radchenko.antoshka@mail.ru*

Предложено соотношение для оценки особенностей структуры молекулярной жидкости по данным о её теплофизических свойствах.

$$T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = B_0 \left(1 - \frac{\langle n \rangle - 4/3}{Z^*} \right) \rho^3 + \frac{1}{\langle n \rangle} \frac{RT}{M} \rho$$

Показано, что зарождение жидкой фазы сопровождается димерной ассоциацией молекул.

В «простых» одноатомных жидкостях при понижении температуры число частиц в ассоциатах (кластерах) возрастает, что приводит к формированию в жидкости «ближнего» порядка. Этот процесс подтверждают данные рентгеноструктурных исследований и результаты измерений изохорной теплоемкости аргона, криптона и др.

Напротив, в жидкостях с многоатомными молекулами, исключая жидкости с водородными связями, практически на всей кривой равновесия жидкость-пар вплоть до области кристаллизации наблюдается лишь димерная ассоциация.

Полученные результаты указывают на то, что, как и в жидких углеводородах в «простых» жидкостях помимо дисперсионных сил ($m=6$), сил отталкивания ($n=12$) проявляют себя дальнедействующие слабые химические силы связи «кулоновского» вида [1], ответственные за ассоциацию частиц. Характер ассоциации определяется особенностями симметрии молекул.

Работа поддержана грантом РФФИ 16-08-01203А.

-
1. Hobza P., Muller-Dethlefs K. Non-covalent Interactions: Theory and Experiment. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2010.