

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КЛАСТЕРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ

Вервейко В.Н., Вервейко М.В.*

КГУ, Курск, Россия

**verveykovn@mail.ru*

Кластеры в жидкостях определяют структурные характеристики и теплофизические свойства жидкостей. Ранее авторы предложили соотношение для функции распределения кластеров в жидкостях по числу частиц, содержащихся в кластере [1]: $f(Z) = \frac{\lambda^m}{6} \cdot Z^{m-1} \cdot e^{-\lambda Z}$, $Z \geq 0$, где Z – число частиц в кластере, $\lambda > 0$ ($\lambda = 1/\theta$) – параметр масштаба, определяемый физическими свойствами жидкости, $m = 4$ – порядок распределения.

Параметр θ является функцией коэффициента молекулярной упаковки η : $\theta = a_1\eta + a_2\eta^2 + \dots + a_n\eta^n \approx (5/2)\eta e^\eta \approx (5/2)(1 + \eta)$, где a_i – коэффициенты разложения в ряд; $\eta \approx 0.22\rho^*$, где $\rho^* = \rho/\rho_c$ – приведенная плотность жидкости.

Используя распределение вероятностей размера кластера по числу частиц и экспериментальные данные по плотности жидкостей, мы оценили и проанализировали наиболее вероятное число частиц в кластере: $\hat{Z} = \frac{m-1}{\lambda} = (m-1)\theta = 3\theta$, среднеарифметическое число частиц

в кластере: $\bar{Z} = \int_0^\infty Z \cdot f(Z) dZ = \frac{m!}{(m-1)!} \frac{1}{\lambda} = \frac{m}{\lambda} = m\theta = 4\theta$ и сред-

неквадратичное число частиц в кластере: $\overline{\bar{Z}} = \sqrt{\bar{Z}^2} = \frac{\sqrt{m(m+1)}}{\lambda} = \sqrt{m(m+1)} \cdot \theta = \sqrt{20} \cdot \theta$ бензола, толуола и их галогенозамещенных в зависимости от параметров состояния при температурах 293–423 К и давлениях 0.1–600 МПа.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (РФФИ) (Проект №16-08-01203).

-
1. Verveiko V.N., Verveiko M.V., Melnikov G.A. // Eur. Phys. J. D. 2016. V. 70. P. 47.