

Особенности структуры самосогласованного поля молекул в жидкости

© Кудряшова Наталья Александровна

Кафедра «Машины и аппараты химических производств». ФГАОУ ВО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. ул. Мира, 28. г. Екатеринбург, 620002. Свердловская область. Россия. Тел.: (912) 262-31-82. E-mail: nakatan@list.ru

Ключевые слова: модель конденсированного состояния, колебания с ограниченной амплитудой, самосогласованное поле молекул, движение молекул в жидкости.

Аннотация

Рассмотрена модель вещества в конденсированном состоянии – ограниченные колебания частиц в самосогласованном поле. Каждая частица перемещается в некотором локальном объеме электромагнитного поля, которое образовано окружающими ее частицами. Все частицы одинаковы, размер частиц не зависит от температуры и внешнего давления. Столкновения молекул происходят абсолютно упруго, среднеквадратичная скорость при столкновениях пропорциональна температуре вещества.

Для численного расчета энергии взаимодействия между молекулами использован сферически симметричный парный потенциал Ми-Леннарда-Джонса. Суммарная потенциальная энергия молекулы в локальном поле рассчитана в соответствии с принципом суперпозиции.

Амплитуды движения частиц вещества в конденсированном состоянии много меньше средних расстояний между их центрами, поэтому вместо меняющегося электромагнитного поля рассмотрено усредненное во времени стационарное поле. Создающие это поле молекулы закреплены в своих центрах колебаний (положениях равновесия). Параметры поля определяются взаимодействием и расположением частиц, оно является самосогласованным.

В результате расчетов для одно-, двух- и трехмерной моделей выявлено, что при небольших амплитудах колебаний центр каждой частицы перемещается в потенциальной яме, средняя ширина потенциальных ям равна удвоенной средней амплитуде ограниченных колебаний. В этом состоянии система частиц моделирует твердое вещество.

При увеличении амплитуды колебаний положение равновесия каждой молекулы становится неустойчивым, равнодействующая сил притяжения со стороны окружающих частиц стремится переместить ее из этого положения. Это состояние системы моделирует жидкость – частицы перемещаются относительно положений неустойчивого равновесия на потенциальных «горках». Обнаруженная трансформация позволяет объяснить свойства вещества в жидком состоянии: неупорядоченное расположение молекул, текучесть, невозможность существования жидкости при низких температурах и при отсутствии внешнего давления.

В жидкости и в аморфном веществе расположение частиц является неупорядоченным, но в жидкости молекулы перемещаются относительно положений неустойчивого равновесия, а в аморфном веществе – в потенциальных ямах.