

СТРУКТУРА ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ*

В веществе, пребывающем в любом агрегатном состоянии, никогда не приходится иметь дело с совершенно беспорядочным расположением атомов или молекул. Для наблюдения дифракции рентгеновских лучей вовсе не требуется полного кристаллического упорядочения [1]. На заседании Германского физического общества в 1920 г. Дебай заявил, что главный максимум функции рассеяния (то есть первое интерференционное кольцо, окружающее первичный луч) должен быть обусловлен интерференцией между различными положениями молекул жидкости, то есть ее молекулярной структурой. «... даже в том случае, когда молекулы можно сравнить с твердыми сферами и они взаимодействуют только таким образом, что препятствуют друг другу проникнуть в область, определенную этой сферой, такой факт сам по себе достаточен для того, чтобы функция рассеяния получилась с максимумом. Этот максимум получается при значении угла, которое определяется отношением длины волны к диаметру сферы, замещающей молекулу. “Теория” этого эффекта кажется столь же трудной, как и теория поправок к уравнению состояния за счет размеров молекул». [1].

В предлагаемой лекции будет рассказано о ключевых идеях, которыми мы руководствуемся при обсуждении вопросов, так или иначе связанных со структурой жидкости. Во многом базовым пониманием мы обязаны выдающимся ученым XX века, и в первую очередь Дебаю. В работе Дебаю и Менке не только удалось впервые выделить структурный фактор из кривой интенсивности упругого рассеяния рентгеновских лучей на жидкой ртути, но и представить объяснение молекулярной структуры жидкостей [2]. Структуру жидкости, определенную с помощью экспериментов по дифракции рентгеновских лучей,

* © Ткачев Н. К., 2020

необходимо рассматривать с позиций статистических средних. Важно, что ее формирование обеспечивается в основном за счет сил отталкивания атомов на малых расстояниях.

Самые точные данные о структуре получаются при дифракции рентгеновских и нейтроновских лучей. Эти данные никогда не удастся интерпретировать математически однозначно, сопоставляя структурному фактору трехмерную модель структуры. Когда в рассеяние вносят вклад несколько сортов, «распутать» эти вклады оказывается еще труднее.

В лекции также будет рассказано о некоторых достижениях современной статистической теории и моделирования в понимании строения простых жидких систем (жидкие металлы, расплавленные соли).

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 18-03-00606).

Список литературы

1. *Debye P.* Zerstreung von Röntgenstrahlen (Рассеяние рентгеновских лучей) // *Ann. Physik.* – 1915. – V. 46. – P. 809–823.
2. *Debye P., Menke H.* Bestimmung der inneren Struktur von Flüssigkeiten mit Röntgenstrahlen (Определение внутренней структуры жидкостей рентгеновскими лучами) // *Phys. Ztschr.* – 1930. V. 31. – P. 797–798.