



**SAMARA
POLYTECH**
Flagship University

Теория строения вещества

Лекция 6

Строение жидкостей, аморфных тел и жидких кристаллов.

Жидкости и аморфные тела

Отличие жидкостей от кристаллов:

- Отсутствие дальнего порядка (но ближний порядок есть)
- Атомы и молекулы не сохраняют свои положения равновесия
- Изотропность свойств

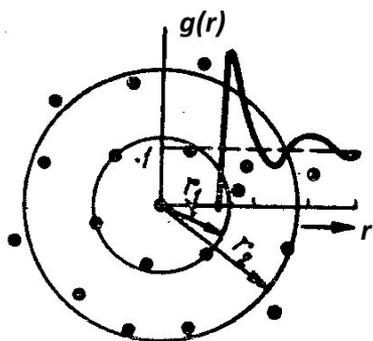
Отличие аморфных тел от жидкостей:

- Атомы и молекулы сохраняют свои положения равновесия
- Очень высокая вязкость

Жидкие кристаллы:

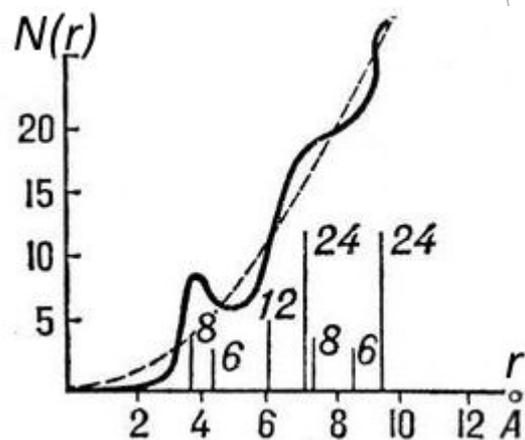
- Атомы и молекулы не сохраняют свои положения равновесия
- Дальний порядок не строгий и не по всем направлениям
- Анизотропия свойств по определенным направлениям

Функция радиального распределения

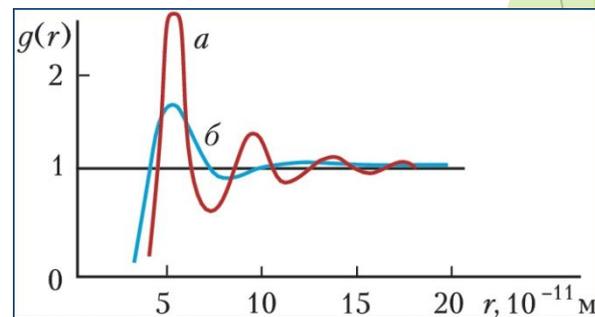
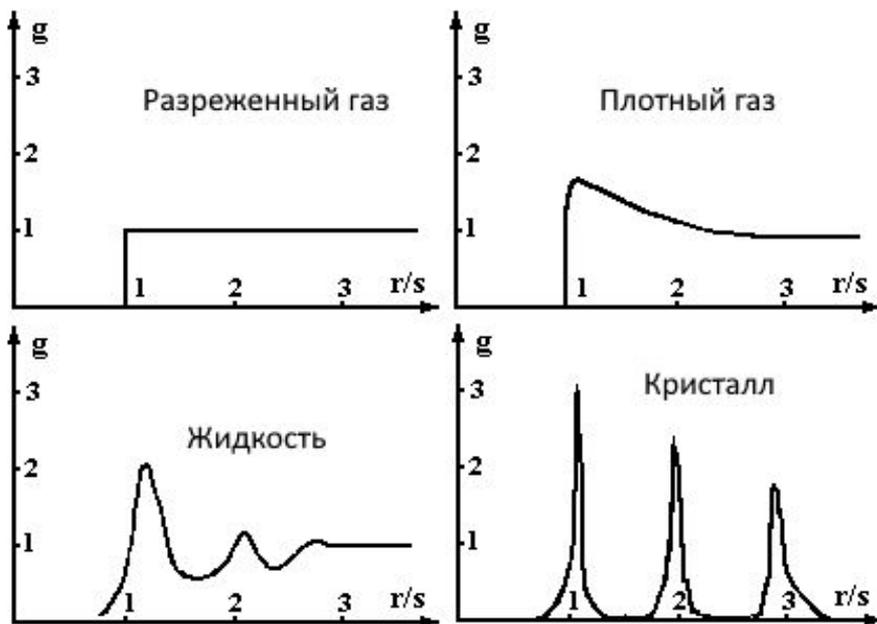


$$g(r) = \rho(r) / \rho_0$$

$$N(r) = 4\pi r^2 g(r)$$



Жидкий и кристаллический Na



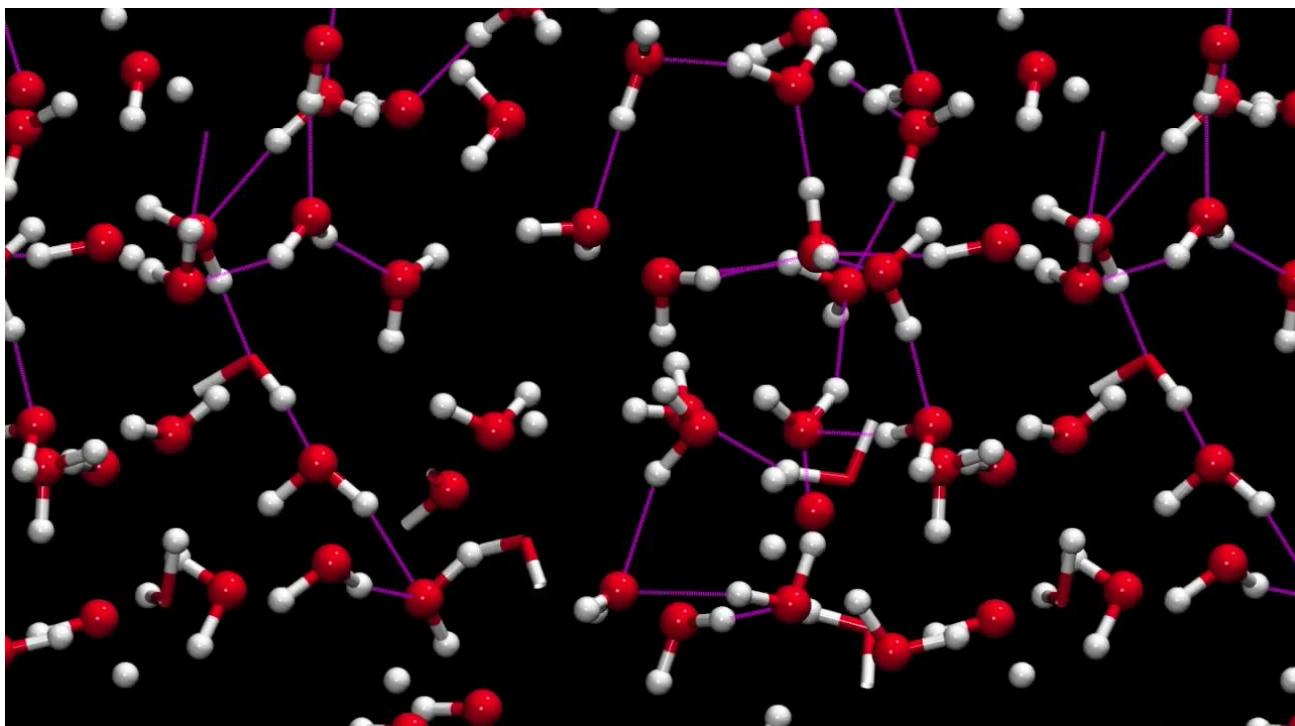
Жидкий Rb:

а) вблизи точки плавления

б) вблизи критической точки

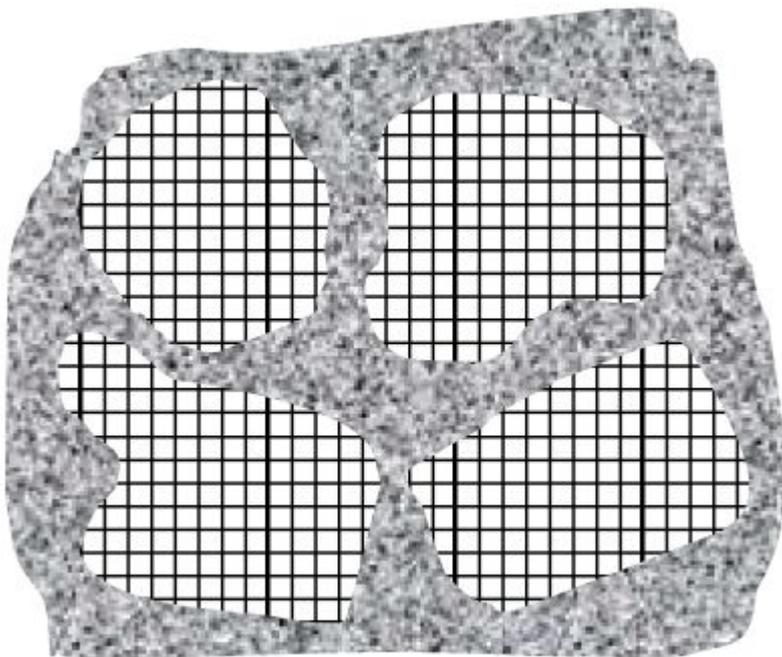
Моделирование структуры жидкостей

Методы молекулярной динамики (MD) - моделирование в режиме реального времени (фемтосекунды - 10^{-15} с)



Теории строения жидкостей

Первые теории предполагали квазикристаллическое строение жидкостей (1920-1930 гг.)



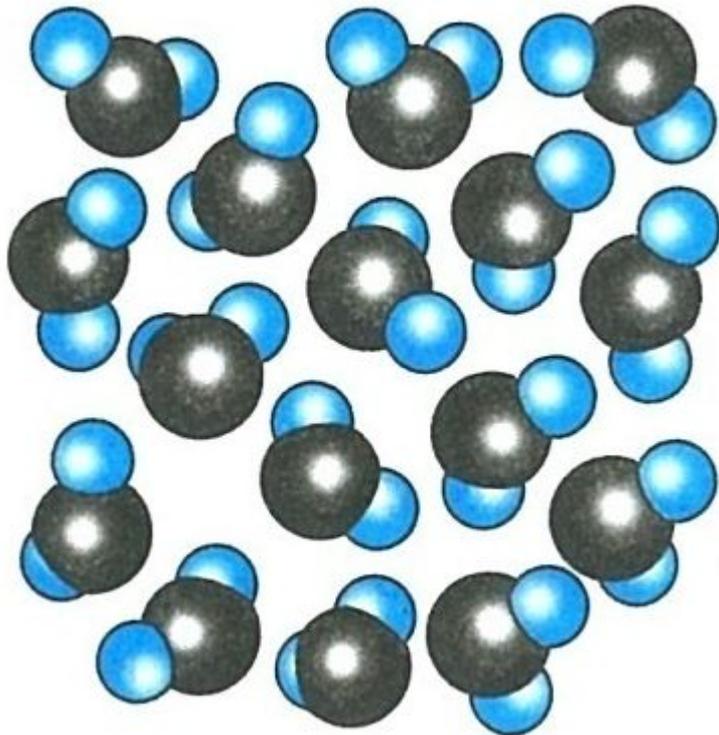
Кластерная теория Стюарта:

Структурно-упорядоченные и неупорядоченные области чередуются

Не объясняет существование переохлажденных жидкостей

Теории строения жидкостей

Теории простых жидкостей - полное разупорядочение; вероятность обнаружения молекулы на любом расстоянии от данной молекулы, превышающем ее диаметр, одинакова

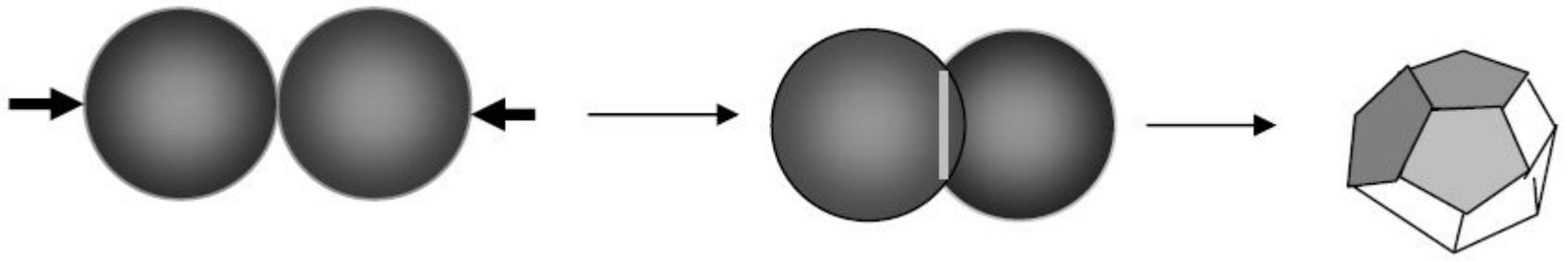


Пригодна для объяснения строения жидких инертных газов, но не для жидкостей с взаимодействующими молекулами

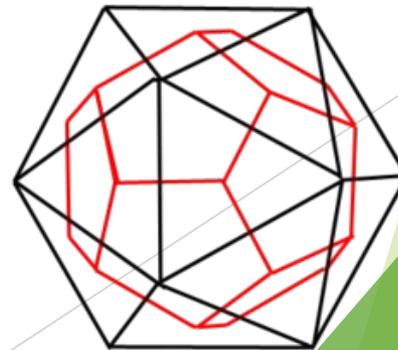
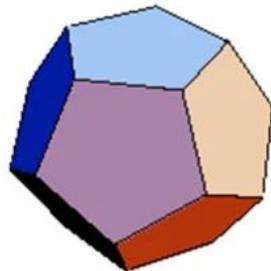
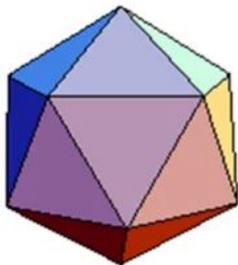
Теории строения жидкостей

Теория Бернала (1950-е гг) - жидкость неупорядочена, но молекулы стремятся к плотной упаковке

Опыт Бернала

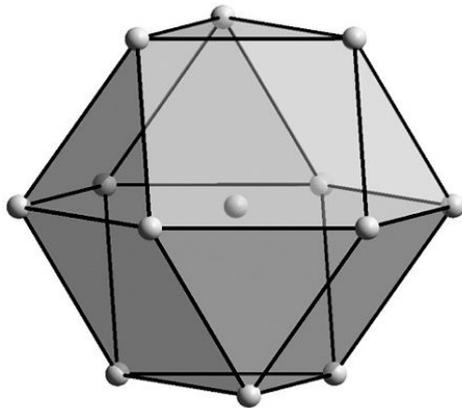


Преобладают полиэдры с пятиугольными гранями, что говорит в пользу присутствия икосаэдрических структур

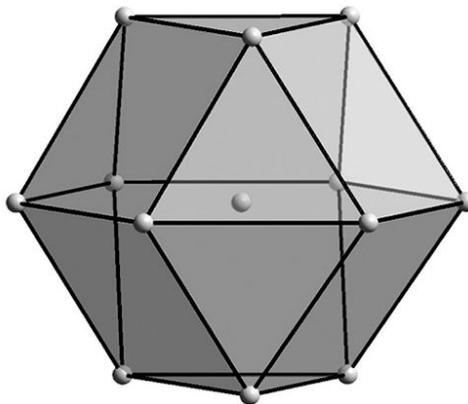


Теории строения жидкостей

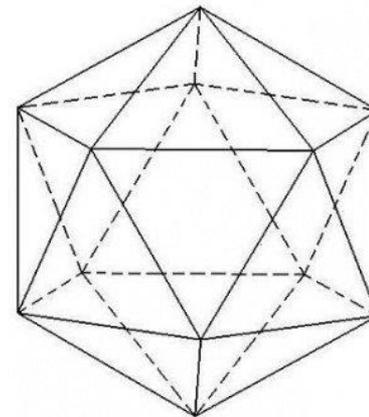
Локальная плотность в модели Бернала может быть даже выше, чем в плотноупакованных кристаллических структурах (ГПУ, ГЦК и др.), так как икосаэдрическая упаковка локально более плотная, чем кубооктаэдрическая



ГЦК



ГПУ

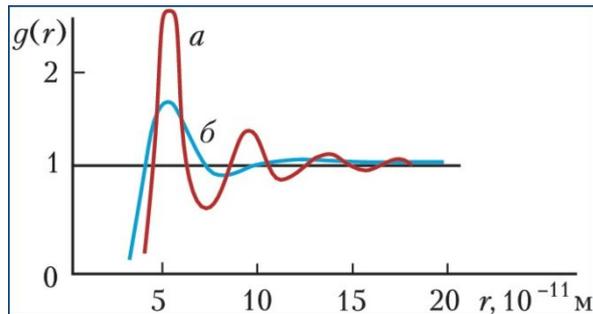


жидкость

Модель Бернала предполагает наличие плотноупакованных и разреженных областей, но построенных не так, как в кристалле

Строение аморфных тел

Аналогично строению жидкостей, однако ближний порядок выражен больше (аналогия с переохлажденными жидкостями)



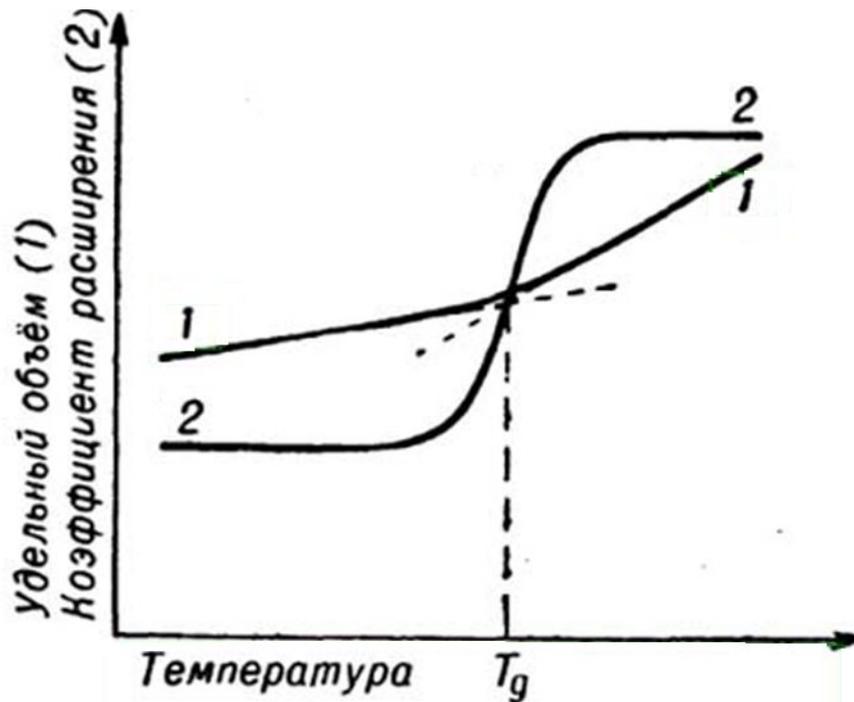
Жидкий Rb:

- а) вблизи точки плавления
- б) вблизи критической точки

Т.о. аморфные тела можно считать переохлажденными жидкостями или жидкостями с высокой вязкостью

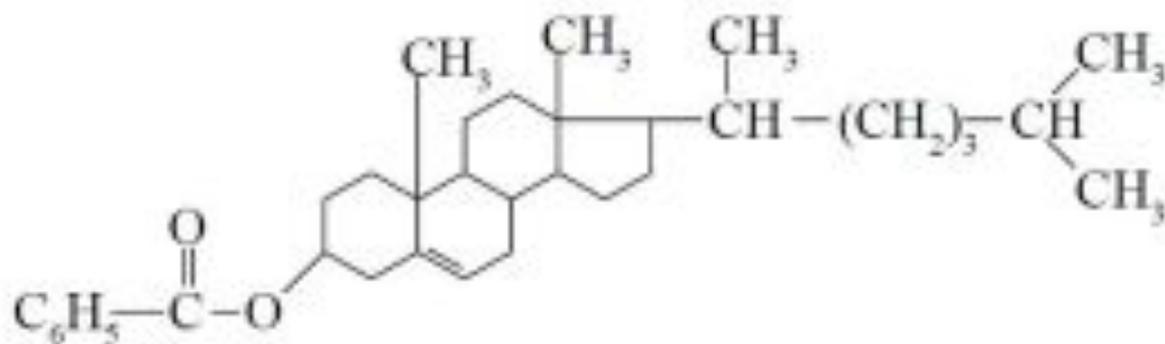
Строение аморфных тел

Аморфные вещества не имеют определённой температуры плавления и характеризуются температурой стеклования (T_g), выше которой аморфное тело переходит в жидкость



Строение жидких кристаллов (мезофаз)

Холестерилбензоат - Ф. Рейнитцер, 1888 г.

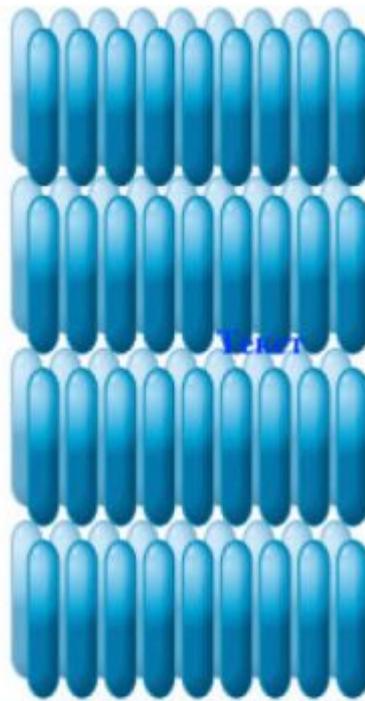


Строение жидких кристаллов

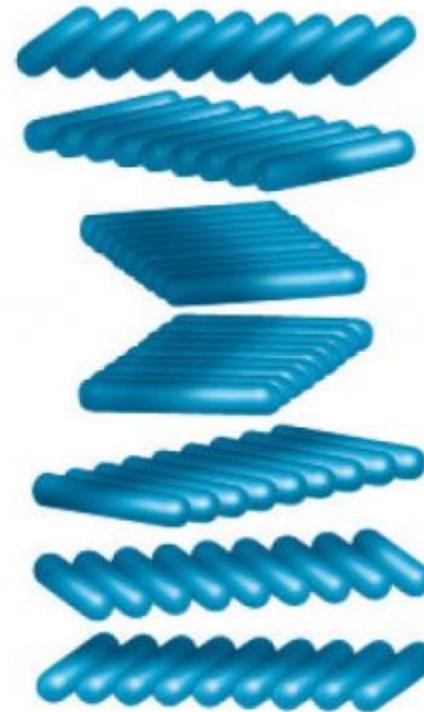
Нематики



Смектики



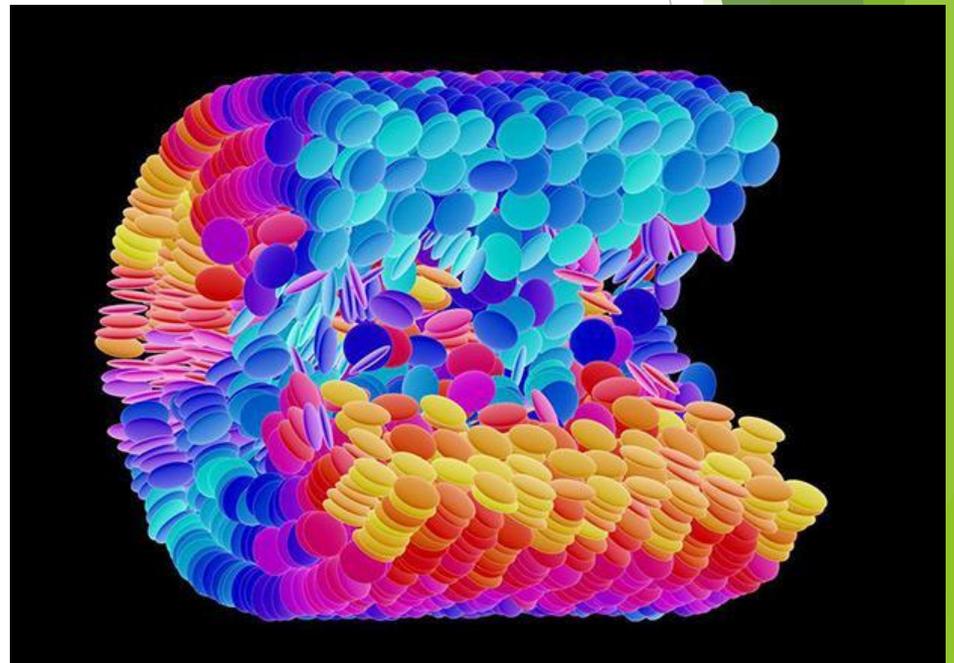
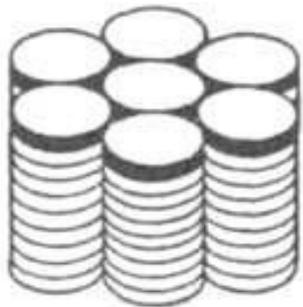
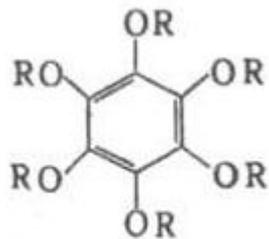
Холестерики



Строение жидких кристаллов

Колончатые (дискотические) жидкие кристаллы - 1977 г.

Бензолгекса-*n*-гептаноат

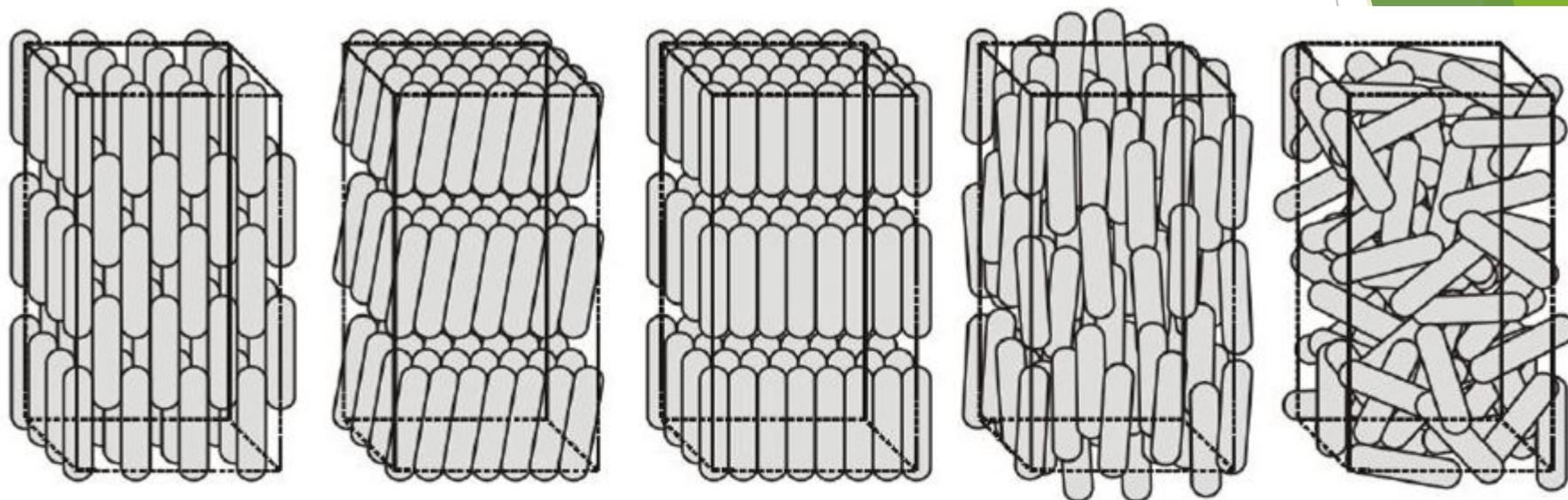


Строение жидких кристаллов

Фазовые переходы

$K \rightarrow CЖК \rightarrow HЖК \rightarrow ИЖ$

$K \rightarrow CЖК \rightarrow XЖК \rightarrow ИЖ$



Твердый кристалл

Жидкокристаллические мезофазы

Изотропная жидкость

Смектик С

Смектик А

Нематик

$T_{пл}$

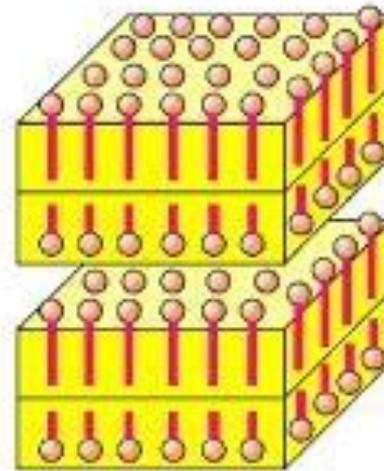
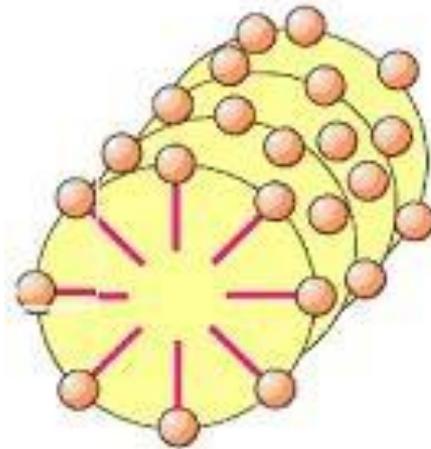
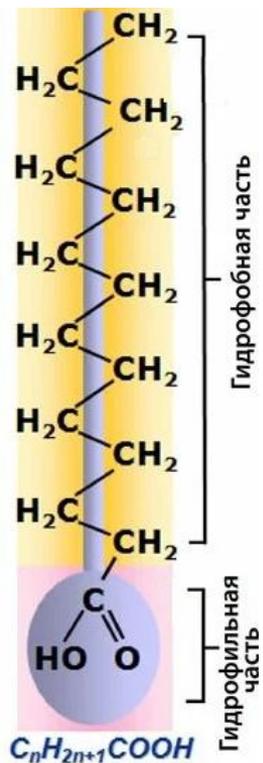
$T_{пр}$

$T_{пр}$ - температура просветления

Строение жидких кристаллов

Термотропные и лиотропные ЖК

Лиотропные ЖК образованы амфифильными молекулами; в растворе эти молекулы образуют мицеллы, которые упорядочиваются



Спасибо за внимание