

К классификации фазовых диаграмм ассоциирующих систем с несколькими типами термообратимых химических связей
Белоусов М.В., Ерухимович И.Я.

аспирант

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Системы, содержащие молекулы, между которыми возможно образование термообратимых химических связей, представляют большой интерес. Наиболее известным представителем таких ассоциирующих систем является вода, где термообратимо образуются и разрываются водородные связи. Поэтому исследование таких систем крайне интересно для многих биологических и технологических проблем, а также в науке о земле (силикатные расплавы также принадлежат к этому классу).

Одной из важных общезначимых задач в этой области является предсказание вида фазовой диаграммы ассоциирующих систем с заданным характером термообратимых связей между их частицами. Для ряда простейших систем эта задача была решена в работах [1,2]. В настоящей работе результаты работ [1,2] обобщаются на случай следующей более сложной ассоциирующей системы. Рассматривается система, содержащая два сорта звеньев A_m и B_n , каждое из которых содержит по m (n) так называемых функциональных групп A (B), между которыми возможны следующие химические реакции: $A + A \leftrightarrow A_2$, $B + B \leftrightarrow B_2$. Зависимость констант равновесия обеих этих реакций от температуры полагается Аррениусовской:

$$k_{ii} = \exp(S_i - \varepsilon_i / T), \quad (1)$$

где S_i и ε_i – энтропия и энергия образования связи между группами i -го сорта, $i = A, B$.

Свободной энергией такой системы имеет вид:

$$F_{STR} = TV \left[\rho_A f_A \left(\frac{\Gamma_{AA}}{2} + \ln(1 - \Gamma_{AA}) \right) + \rho_B f_B \left(\frac{\Gamma_{BB}}{2} + \ln(1 - \Gamma_{BB}) \right) + \frac{TV}{\vartheta_0} \left((1 - \phi) \ln(1 - \phi) + \chi \phi_A \phi_B \right) \right]$$

где $\phi = \phi_A + \phi_B$ – объемная доля всех звеньев (A и B), ϑ_0 – удельный объем звена, Γ_{ii} – конверсии прореагировавших групп, ρ_A, ρ_B – плотности звеньев A и B

Литература

1. I.Ya. Erukhimovich and A.V. Ermoshkin, J. Chem. Phys. 116, 368 (2002).
2. M.V. Thamm and I.Ya. Erukhimovich, J. Chem. Phys. 119, 5 (2003).
3. В.И. Арнольд. Теория катастроф. УРСС 2004.
4. В.И. Арнольд, А.Н. Варченко, С.М. Гусейн-Заде. Особенности дифференцируемых отображений. МЦНМО 2004.