

УДК 539.2

Влияние молекулярных конформаций на физико-химические свойства кластеров

В.М. Кузнецов<sup>1</sup>, К.Б. Терешкина<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва,  
Россия

<sup>2</sup> Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия

Обнаружено, что межмолекулярные колебательные спектры Ван-дер-Ваальсовых димеров, рассчитанные методами *ab initio* и состоящие из четырёх или шести частот, можно представить в виде степенных зависимостей с малой положительной, нулевой или отрицательной размерностью.

Веществ с подобного рода непрерывными спектрами раньше известно не было. Следовательно, континуальное представление состояния вещества возможно не только тогда, когда число составляющих его атомов или молекул велико, но и тогда, когда оно незначительно, то есть, в наноструктурах, кластерах и даже димерах, представляющих собой минимально возможное связанное состояние частиц в природе.

Введённая в [1, 2] фрактальная модель континуальной среды обобщает известную твердотельную модель Дебая с показателями размерности колебательного спектра  $d_f = 1, 2, 3$  на весь диапазон их целых и дробных значений  $-\infty \leq d_f \leq \infty$ . Дополнительно в этой модели помимо дебаевской температуры  $\theta_H = \hbar\omega_{\max}/k_B$  здесь  $\hbar$  и  $k_B$  - постоянные Планка и Больцмана,  $\omega_{\max}$  – максимальная частота) вводится ещё одна температура  $\theta_N = \hbar\omega_{\min}/k_B$ , связанная с нижней границей спектра (в модели Дебая  $\theta_N = 0$  К). Температура  $\theta_N$  существенна при исследованиях тепловых свойств кластеров и наноструктур. В данной работе модель применялась для исследования влияния различных конформаций изомеров кластеров (например, воды, метана и др.) на их теплоемкость при различных температурах. При этом температурные зависимости теплоемкости различных изомеров отличаются друг от друга и зависят от размерности  $d_f$  их колебательных спектров и величин характеристических температур  $\theta_H$  и  $\theta_N$ , определяющих границы спектра.

#### Литература

1. Кузнецов В.М., Хромов В.И. Фрактальное представление теории Дебая для исследования теплоемкости макро- и наноструктур. // ЖТФ. 2008. Т. 78. № 11. С. 11-16.
2. Кузнецов В.М., Хромов В.И. О существовании макро и наноструктур с фононными спектрами малой фрактальной размерности.// ПЖТФ. 2012. Т. 38. № 5. С. 11-18.
3. Kuznetsov V. and Tereshkina K. "Fractal Continual Model of Matter for Classification of Nanostructures, Clusters and Massive Bodies". // Nanomaterials:

Application & Properties, North America,  
2014. <http://nap.sumdu.edu.ua/index.php/nap/nap2014/paper/view/1447/686>  
4. *Granovsky A.A.* Firefly version 8. <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>