

Ciecze wykazują anomalie, których pochodzenia nauka jeszcze nie rozumie. Wszyscy wiemy, że rozszerzają się one przy wzroście temperatury, na przykład gdy temperatura wzrasta o jeden stopień Celsjusza. Przy niskich ciśnieniach oraz przy niskich temperaturach, wzrost temperatury o 1 stopień Celsjusza, powoduje, że ciecz rozszerza się bardziej, niż wówczas, gdy temperatura jest wysoka. Bazując na powyższym, rozszerzalność zależy również od ciśnienia wywieranego na ciecz. Jest to zatem dosyć intuicyjne, że im wyższe jest ciśnienie, tym mniejsza jest ekspansja cieczy przy tej samej zmianie temperatury. Z drugiej strony, mniej intuicyjne jest to, że dla wybranej cieczy, gdy ciśnienie jest wyższe od pewnego progu, rozszerzalność jest większa w niższych temperaturach niż w wyższych, co prowadzi do zmiany tendencji przy niższych ciśnieniach.

To zjawisko, które według niektórych teorii ma być uniwersalne, tzn. ma dotyczyć wszystkich cieczy, jest rzeczywiście obserwowane doświadczalnie tylko dla niektórych z nich. Bardzo zastanawiające jest również to, że ciecze o bardzo podobnym składzie cząsteczkowym zachowują się w bardzo różny sposób, niektóre z nich wykazują odwrotną zależność rozszerzalności w wysokiej i niskiej temperaturze od ciśnienia, a inne nie.

Odwroćenie trendu rozszerzalności cieplnej w funkcji temperatury po przekroczeniu danego progu ciśnienia wpływa również na inne właściwości cieczy. Rozważmy na przykład tzw. pojemność cieplną, czyli ilość energii, jaką trzeba dostarczyć do cieczy, aby podnieść jej temperaturę o 1 stopień Celsjusza. Pojemność cieplna cieczy określa na przykład jej przydatność jako czynnika chłodzącego: (zimna) ciecz o dużej pojemności cieplnej jest bardzo skuteczna w chłodzeniu gorącego obiektu. Gdyby miała mniejszą pojemność cieplną, do schłodzenia tego samego obiektu potrzebna byłaby większa ilość cieczy. W przypadku cieczy, w których trend ekspansyjności cieplnej jest odwrotny, pojemność cieplna wykazuje minimum w pobliżu ciśnienia progowego. Dlatego też ciecze te nie są najlepiej przystosowane do pracy w takich warunkach ciśnieniowych.

Pomimo intensywnych badań eksperymentalnych i teoretycznych w tej dziedzinie, naukowcy nie zrozumieli jeszcze, jakie właściwości chemiczne cząsteczek wchodzących w skład cieczy decydują o charakterystyce jej rozszerzalności cieplnej, wynikającej z tego "anomalii" pojemności cieplnej itp. Dzieje się tak dlatego, że techniki te, mimo swojej mocy, nie dają bezpośredniego dostępu do mikroskopowego zachowania układu, nie pozwalają poznać jego tajemnic na poziomie atomistycznym. Dzięki postępowi mocy obliczeniowej komputerów i technik obliczeniowych stosowanych w fizyce i chemii chcemy rzucić światło na opisaną powyżej zagadkę. Posłużymy się dynamiką molekularną, techniką polegającą na symulacji zachowania atomów w cieczy. Dynamika molekularna pozwala nam "śledzić film tańczących atomów w szklance z cieczą". W rzeczywistości nie będziemy śledzić prawdziwych atomów cieczy, lecz atomy symulowane na superkomputerze, maszynie zdolnej do wykonywania tysięcy miliardów operacji matematycznych na sekundę. Co ciekawe, ciecze można symulować w komputerze w warunkach, np. ciśnienia i temperatury, przewyższających te, które są dostępne w eksperymentach. Co więcej, na komputerze można badać ciecze, które trudno byłoby zsyntetyzować w laboratorium, nawet ciecze wytworzone przez nieistniejące gatunki atomów. W ten sposób można wyodrębnić efekty, których w laboratorium nie da się zbadać. Innymi słowy, będziemy używać superkomputerów jako laboratoriów na chipie, które pozwolą nam poznać intymną naturę cieczy otrzymanych w warunkach, które mogą być trudno dostępne w prawdziwym laboratorium, a w końcu zidentyfikować mikroskopowe pochodzenie niektórych bardzo zagadkowych anomalii w cieczech.