

11. Немцов В. Б. Жидкокристаллическая модель стержня как модель молекулы ДНК // Труды БГТУ. Физ.-мат. науки и информатика. Минск, 1997. - С. 60-65.
12. Nemtsov V. B. Statistical theory of the elastic properties of DNA molecules // Nonlinear phenomena in complex systems.-1998. V.1. P.109-113.

УДК 536.758+539.311

И. И. Наркевич, профессор;
 В. И. Наркевич, ст. преп. (БГПА);
 А. В. Жаркевич, ассистент

УЧЕТ ДВУХЯЧЕЕЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ ПРИ ВЫВОДЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ОБОБЩЕННОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ

The generalized lattice model of the condensed molecular environment is proposed in the frame of statistical theory. The analytical state equation of Van-der-Waals type was obtained by famous formulas for great thermodynamic potential, entropy, system energy and filling numbers, formally corresponding the Fermi-Dirac statistic. The nonlinear equation is obtained by varying the great thermodynamic potential at unknown parameters of the state equation (as intrinsic parameters of a thermodynamic system). The solution of this equation allows to reveal all types of phase transitions in simple molecular environment (crystal-liquid, liquid-gas and crystal-gas).

Процесс решения проблемы фазовых переходов в термодинамических системах имеет уже давнюю историю. В результате длительной работы по поиску ответов на многочисленные вопросы общего и частного характера учеными многих школ и направлений к настоящему времени создана стройная флуктуационная теория фазовых переходов [1]. Важнейшее достижение этой теории связано с описанием сингулярных особенностей поведения свойств вещества в окрестности критической точки жидкость - газ [2]. Следует отметить, что конечный результат этих хитроумных изысканий, в сконцентрированном виде содержащийся в методе ренормгруппы (РГ), отмечен Нобелевской премией 1982 года, которая присуждена К. Вильсону. И, несмотря на безусловно большой прогресс в решении проблемы фазовых переходов на разных уровнях знаний, имеется еще много нерешенных вопросов и прежде всего в интересующей нас области молекулярно-статистической теории конденсированных сред.

Применение разработанного ранее двухуровневого статистического описания свойств однородных и неоднородных систем с флуктуирующим полем плотности к изучению молекулярных систем в области фазовых переходов позволило разработать простую статистико-механическую модель конденсированной молекулярной среды. Для этого используется метод условных распределений [3], в котором весь объем V системы мысленно разделяется на M равных ячеек объемом ω так, чтобы в каждой из них могло находиться не более одной частицы сорта $\alpha = a, b$ (a - молекулы, b - вакансии). В результате было получено аналитическое уравнение состояния молекулярной конденсированной среды [4]:

$$p = \frac{\Theta}{\omega} \ln \left(\frac{v}{v - \omega} \right) - \frac{A\omega}{2v^2}, \quad (1)$$

где $\Theta = kT$, k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура, v - молекулярный объем, A - известная функция ω .

Объем микроячейки ω является неизвестной функцией от v . Поэтому, чтобы построить изотерму давления, необходимо установить вид этой зависимости. Для этого рассмотрим открытую термодинамическую систему, помещенную в термостат. Такая система описывается большим термодинамическим потенциалом $\Omega \equiv -pV$:

$$\Omega = U - TS - \mu N, \quad (2)$$

где U - внутренняя энергия системы, S - энтропия, μ - химический потенциал, N - число молекул (частиц) системы.

Будем считать, что микроячейки составляют кубическую гранецентрированную решетку. Взаимодействие между молекулами, размещенными в центрах ячеек (узлах решетки), описывается потенциалом Леннарда-Джонса:

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right), \quad (3)$$

где ε - энергетический параметр, т.е. глубина потенциальной ямы, σ - линейный параметр, r - расстояние между молекулами.

Далее воспользуемся ранее полученным выражением для корреляционной функции n_{aa} [5]. Она определяет вероятность заполнения молекулами пары ячеек, центры которых находятся на расстоянии g :

$$n_{aa} = n + 0.5(1 - \sqrt{1 + 4n(1-n)f})/f, \quad (4)$$

где $n = \omega/v$ - концентрация занятых ячеек, $f = e^{-\Phi(r)/kT} - 1$ - функция Майера. Исходя из этого, получим следующее выражение для внутренней энергии U системы:

$$U = \frac{1}{2} \frac{V}{\omega} \sum_{m=1}^k n_{aa} z_m \Phi(r_m), \quad (5)$$

где m - номер координационной сферы радиуса r_m , а z_m - число ячеек, центры которых лежат на этой сфере.

Поскольку числа заполнения ячеек принимают значения 0 или 1, то для выражения энтропии системы воспользуемся известным выражением энтропии фермионного газа:

$$S = -k \frac{V}{\omega} [n \ln(n) + (1-n) \ln(1-n)]. \quad (6)$$

Подставляя (4-6) в (2) и учитывая взаимодействие только ближайших соседей для большого термодинамического потенциала, получим следующую формулу:

$$\Omega^* = V \left\{ U^*(\omega, n) + \frac{\Theta^*}{\omega} [n \ln(n) + (1-n) \ln(1-n)] - \mu^* \frac{n}{\omega} \right\}, \quad (7)$$

где $\Omega^* = \Omega/\varepsilon$, $\Theta^* = kT/\varepsilon$, $\mu^* = \mu/\varepsilon$, $r^* = r/\sigma$ - безразмерные большой термодинамический потенциал, температура, химический потенциал и расстояние соответственно. Функция U^* определяется следующим выражением (далее ω , v и p - безразмерные величины):

$$U^* = 6n_{aa}(n, \omega) \Phi(r)/\varepsilon \omega, \quad \Phi(r^*)/\varepsilon = \Phi^*(\omega) = \frac{1}{\omega^4} - \frac{2}{\omega^2}. \quad (8)$$

После варьирования большого термодинамического потенциала (7) по n и ω и исключая затем химический потенциал μ^* , получим уравнение

$$\frac{\Theta^*}{n^2 v} \ln(1-n) = \frac{\partial U^*}{\partial n} + \frac{\partial U^*}{\partial \omega} \frac{d\omega}{dn}, \quad \omega = nv. \quad (9)$$

Уравнение состояния для давления p и химического потенциала μ получается в результате использования выражения (7) для потенциала Ω^* и уравнения, которое его минимизирует:

$$p = \begin{cases} -\frac{\Theta^*}{\omega} \ln(1-n) + n \frac{\partial U^*}{\partial n} - U^* \\ -\omega \frac{\partial U^*}{\partial \omega} - U^* \end{cases},$$

$$\mu^* = (p + U^*)\omega + (1-n) \frac{\partial U^*}{\partial n} \omega + \Theta^* \ln(n). \quad (10)$$

Рассматривая выражение (8) для U^* и рассчитывая необходимые для (9) частные производные, получим следующее уравнение:

$$\frac{\Theta^*}{n^2 v} \ln(1-n) = 6 \left(\frac{\partial n_{aa}}{\partial n} + \frac{\partial n_{aa}}{\partial \omega} v \right) \Phi_1^*(\omega) + 6 n_{aa} \frac{d\Phi_1^*(\omega)}{d\omega} v, \quad (11)$$

где

$$\Phi_1^*(\omega) = \frac{\Phi^*(\omega)}{\omega}, \quad \frac{d\Phi_1^*(\omega)}{d\omega} = -\frac{5}{\omega^6} + \frac{6}{\omega^4}, \quad (12)$$

$$n_{aa} = n + \frac{1 - \sqrt{1+x}}{2f}, \quad (13)$$

$$x = 4n(1-n)f, \quad f = \exp(-\Phi^*(\omega)/\Theta^*) - 1, \quad (14)$$

$$\frac{\partial n_{aa}}{\partial n} = 1 - \frac{1-2n}{\sqrt{1+x}}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial n_{aa}}{\partial \omega} = -\frac{\partial f}{\partial \omega} \left(\frac{n(1-n)}{f\sqrt{1+x}} + \frac{1-\sqrt{1+x}}{2f^2} \right). \quad (16)$$

Для того чтобы построить изотерму давления для данной статико-механической модели среды, необходимо установить вид зависимости параметров этой модели (ω и n) от молекулярного объема v . Для этого следует решить уравнение (11). Учитывая структуру выражений (12-16), видно, что оно является сильно нелинейным. Решить такое уравнение аналитически во всей области термодинамических

параметров проблематично. Поэтому для решения нелинейного уравнения (11) необходимо использовать численные методы с применением ЭВМ. С помощью пакета программ «Математика 3.0» отыскивались точки пересечения двух функций, стоящих в правой и левой частях уравнения (11). При заданных значениях температуры Θ^* и объема v параметры точки пересечения являются искомыми решениями нелинейного уравнения. Учитывая взаимосвязь между ω , n и v , удалось найти необходимые зависимости, которые представлены на рис. 1.

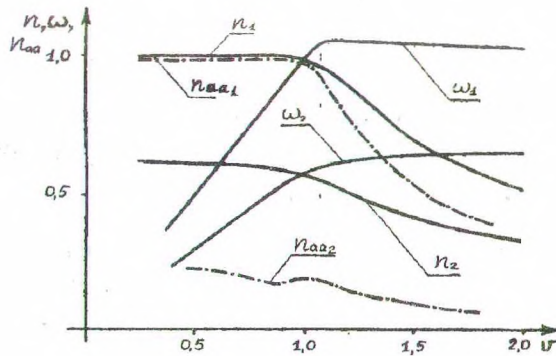


Рис. 1. Зависимость концентрации занятых микроячеек (n), объема микроячеек (ω) и двухячеечной корреляционной функции (n_{aa}) от молекулярного объема v при температуре $\Theta^* = 1$

Следует отметить тот факт, что в области малых молекулярных объемов ($v < 1$) имеются два решения уравнения (11). Это приводит, в свою очередь, к расщеплению изотермы давления p (рис. 2) и химического потенциала μ (рис. 3) системы на две ветви.

Одна из ветвей давления p_1 и химического потенциала μ_1 соответствует решению, характеризующемуся числами заполнения n микрообъемов, очень близкими к единице. При этом в структуре молекулярной модельной системы наблюдается ближний и дальний порядок, что указывает на кристаллическое состояние среды. Вторая ветвь получается при использовании второго решения. В этом случае числа заполнения n микрообъемов значительно меньше единицы. При объеме v , стремящемся к нулю, числа заполнения асимптотически стремятся к $n \approx 0.6$. Это указывает на отсутствие дальнего, т. е. кристаллического порядка в среде. Происходит делокализация распределения молекул в окрестности центров микроячеек, что характерно уже для аморфного состояния системы.

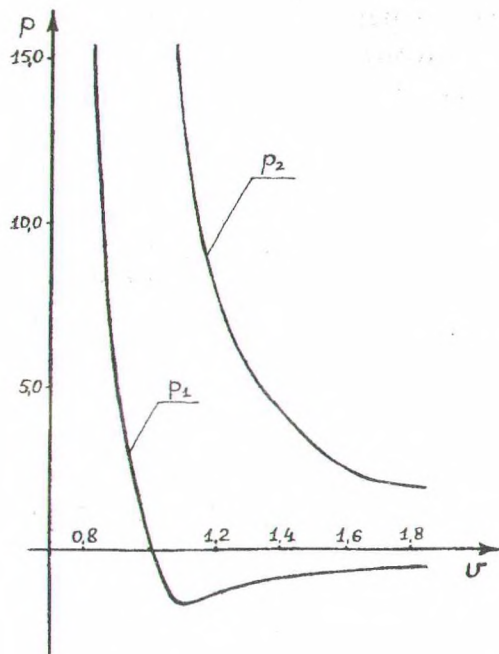


Рис. 2. Изотерма давления p простой молекулярной конденсированной среды ($\Theta^* = 1$): p_1 - кристаллическая ветвь; p_2 - аморфная ветвь

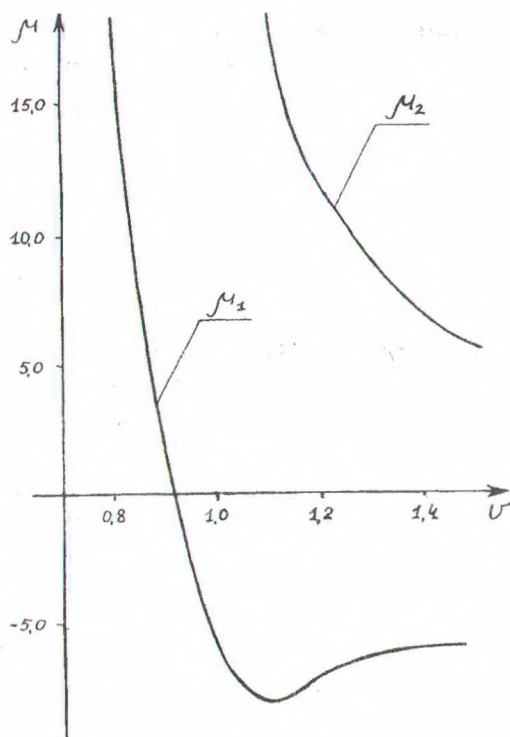


Рис. 3. Зависимость химического потенциала μ системы от ее молекулярного объема v ($\Theta^* = 1$): μ_1 - кристаллическая ветвь; μ_2 - аморфная ветвь

ЛИТЕРАТУРА

1. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов.- М.: Наука, 1982.
2. Ма Ш. Современная теория критических явлений.- М.: Мир, 1980.
3. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем.- М.: Наука, 1979.
4. Наркевич И. И., Лобко С. И., Жаркевич А. В., Хроль В. Н. Уравнение состояния типа Ван - дер - Ваальса для кристаллической, жидкой и газообразной фаз // Труды БГТУ, сер. физ.-мат. наук. Минск, 1996, вып. IV. - С. 46-55.

5. Наркевич И. И. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с дефектами // Высокочистые вещества. 1990. № 1. - С. 67-75.

УДК 537.84

А. Н. Вислович, доцент,
А. Б. Сухоцкий, ассистент

ОТРАЖЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГАРМОНИКИ МАГНИТОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ОТ НАМАГНИЧИВАЮЩЕГОСЯ СЛОЯ

Conducted experimental study of reflecting a spatial harmonica of magnetostatic field from nonlinear magnetizing layer. Description possibility of this phenomena on base of modified linear theory are considered.

Введение

Теория магнитостатического поля в магнетиках (и связанная с ней математической аналогией теория электростатического поля в диэлектриках) является классическим разделом электродинамики сплошных сред. За длительную историю развития проблемы в литературе рассмотрено большое число распределений поля для конкретных геометрий. Среди них можно выделить несколько случаев, имеющих фундаментальное значение, к примеру, поле эллипсоида, возбуждаемое однородным внешним полем [1]. Это распределение используется в физических теориях, методах измерений, при технических оценках и расчетах.

К такого рода примерам можно также отнести исследуемое в настоящей работе поле плоскопараллельного слоя в неоднородном внешнем поле, периодическом вдоль слоя. Это распределение является ключевым в теории статического поля в слоистой среде, частные аспекты которой рассеяны по технической литературе различного профиля. Приложения этой теории существенно расширились при разработке магнитожидкостных устройств, в которых плоский либо тонкий цилиндрический слой магнитной жидкости взаимодействует с неоднородным периодическим в пространстве полем. Такая геометрия встречается в магнитожидкостных подшипниках и опорах [2], устройствах для определения свойств магнитных жидкостей [3], технологических установках [4], сепараторах [5-6] и др. Изучению взаимодействия пло-