5. Волков С.Н., Косевич А.М., Вайнреб Г.Е. Теоретическое изучение низкочастотных колебаний макромолекул ДНК // Биополимеры и клетка. Т.5. N 6. 1989. – С.32–39.

6. Nemtsov V.B, Kamlyuk A.N. Evaluation of the force constant of a DNA molecule using its model in the form of coil springs // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. V. 74. N. 5. 2001. – P.1253–1261.

УДК. 536.758+539.311

И.И. Наркевич, профессор; С.Я. Жукович, аспирант; Д.А. Павленко, студент

МОДИФИЦИРОВАННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ГАУССА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ КРИСТАЛЛОВ С ВАКАНСИЯМИ

Statistical theory of tension is developed here under a two – level molecular – statistical approach [1]. It is used to study the properties of crystals with vacancies viewed as a statistical system [2]. The micro– and macrostructure of the system of interacting molecules and the subsystem of vacancies in the theory of deformed crystals under study are described by microscopic correlative functions of conditional distribution by L.A. Rott [3] (microlevel) and fields of average numbers of filling with molecules of primitive crystal cells and various couples of these cells (macrolevel). For defining them we resort to the method of BBGKI [4] and the method of thermodynamic functionals of density [5].

Проведенные при разработке одномерной статистической модели растяжения – сжатия кристалла с вакансиями исследования показали [6], что возможно аналитическое изучение деформации в приближении Гаусса для потенциалов средних сил, которые определяют коррелятивные функции распределения частиц и вакансий, т.е. описывают микро- и макроструктуру кристалла, а также внутреннюю энергию, энтропию и свободную энергию неоднородной конденсированной среды [1]. Учет структуры "сплошной среды" на всех уровнях описания является важным элементом нового подхода, который изложен в трехтомнике "Статистическая теория открытых систем" [2]. Потенциалы средних сил удовлетворяют бесконечной цепочке интегродифференциальных уравнений для коррелятивных функций F_{11} метода условных распределений [3] с одночастичным заполнением молекулами элементарных ячеек объемом ω, число M которых больше числа частиц N ($N_b = M - N$ – число пустых ячеек, т.е. вакансий, концентрация которых $n_b = N_b / M$).

После обрыва цепочки уравнений и использования метода ББГКИ [4] совместно с методом термодинамических функционалов плотности [5] получено замкнутое интегральное нелинейное уравнение яяяяядля младших потенциалов средних сил φ_{lm} [1], которое для одномерной модели растяжения – сжатия имеет следующий вид [7,8] (Ф – потенциал Леннарда – Джонса):

$$e^{-\varphi(x)} = \frac{n_{lm}^{aa}}{n_a} \frac{\int\limits_{\omega_m} e^{-\Phi(\tilde{r})} e^{-\varphi(x')} dx'}{\int\limits_{\omega_m} e^{-\varphi(x')} dx'} + \frac{n_{lm}^{aв}}{n_a} \frac{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(x)} e^{-\varphi(-x)} dx}{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(-x)} dx}. \qquad (1)$$

Двухъячейковые числа заполнения $n_{ав}$ и определяющий их коррелятор z рассчитываются по формулам [1,9]:

$$n_{ав} = \frac{-1+\sqrt{1+4n_a n_в z}}{2z}, \qquad z = \frac{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(x)} e^{-\varphi(-x)} dx}{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(-x)} dx} - 1. \tag{2}$$

Здесь и в последующих соотношениях испяользуются потенциалы $\varphi(x)$ и $\Phi(\tilde{r})$, включающие в себя температуру $\theta = kT$, а именно:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\theta}\varphi_{lm}(q_l), \quad \Phi(\tilde{r}) = \frac{1}{\theta}\Phi(\tilde{r}_{lm}). \tag{3}$$

Все конкретные расчеты выполняются с учетом взаимодействия только ближайших соседей, поэтому в записи потенциалов φ и Φ, а в дальнейшем и чисел заполнения пар ячеек опускаются индексы l и m, определяющие номера ячеек, по которым ведется интегрирование в уравнении (1). Выполненные разложения потенциала Леннарда – Джонса и потенциала φ по отклонениям молекул от центров ячеек (узлов линейной цепочки) в квадратичном приближении позволили реализовать аналитически интегрирование в (1) и получить при $n_в << n_a$ приближенное решение для потенциала φ, которое для нормированной на концентрацию n_a одночастичной функции $\hat{F}_{11}(x)$ соответствует приближению Гаусса:

$$e^{-\varphi(x)} \cong e^{-(\varphi_1+\alpha_1 x+\beta_1 x^2)}, \quad \hat{F}_{11}(x) = n_a\sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}}\, e^{-2\beta_1 x^2}. \tag{4}$$

Поскольку $n_в << n_a$, то в уравнении (1) оказалось возможным отбросить второе слагаемое $n_{ав} \cong 0$, и для коэффициентов φ_1, α_1 и β_1 в разложении потенциала $\varphi(x)$ была получена соответствующая система алгебраических уравнений, так что по существующей терминологии разрабатываемая математическая модель является точно решаемой задачей статистической теории упругости.

Структура нелинейного уравнения (1) показывает, что при уточнении его решения ($n_{ав} \neq 0$) можно использовать метод последовательных приближений и, учитывая отброшенное в приближении Гаусса второе слагаемое

$$B = \frac{n_{ав}}{n}\frac{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(x)} e^{-\varphi(-x)} dx}{\int\limits_{\omega_l} e^{-\varphi(-x)} dx}, \tag{5}$$

искать решение уравнения (1) в модифицированном за счет вклада подсистемы вакансий приближении Гаусса для функции $f(x)=\exp\{-\varphi(x)\}$:

$$f(x) \cong A e^{-\alpha x-\beta x^2} + B, \quad A = \frac{n_{aa}}{n} e^{-\varphi^a(0)},$$

где $$e^{-\varphi^a(x)} = \frac{\int\limits_{\omega_m} e^{-\Phi(\tilde{r})} e^{-\varphi(x')} dx'}{\int\limits_{\omega_m} e^{-\varphi(x')} dx'}. \qquad (6)$$

Четырехпараметрическое приближение (6) с малым параметром B позволяет использовать аналитические приемы решения интегрального уравнения (1), если при вычислении соответствующих интегралов по объемам ячеек воспользоваться следующей схемой интегрирования функций $F(x)$, содержащих сумму экспоненты с четко выраженным максимумом (приближение Гаусса) и константы, учитывающей непосредственный вклад подсистемы вакансий ($F(x)=C_1+C_2 \exp\left\{-qx-px^2\right\}$:

$$\int\limits_{\omega} F(x)dx = \int\limits_{-R_0/2}^{R_0/2} C_1 dx + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} C_2 \exp\left\{-qx-px^2\right\} =$$

$$= C_1 R_0 + C_2 \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{q^2/p}, \; p>0. \qquad (7)$$

Здесь, как и ранее [7,8], интегрирование функций типа Гаусса по отклонениям x в конечных пределах объемов ω ячеек (R_0 – расстояние между соседними узлами недеформированной цепочки занятых и вакантных узлов) заменено обоснованно на интегрирование в бесконечных пределах. Именно этот прием и обеспечивает дальнейшее продвижение в решении сильно нелинейного одномерного интегрального уравнения (1) аналитическими методами. Вместе с тем открывается возможность для разработки двумерной (плоская задача) и трехмерной статистических моделей деформирования кристаллических образцов с вакансиями, которые являются “строительным материалом” для всевозможных мезоскопических и макроскопических дефектов в реальных кристаллах (дислокации, поры, границы зерен микрокристаллов).

Проиллюстрируем возможности модифицированного приближения Гаусса вида (6) на примере расчета одночастичной коррелятивной функции распределения молекулы вблизи произвольного узла линейной однородно деформированной цепочки из M узлов. Используя выражение, которое связывает функцию $\hat{F}_{11}(x)$ с потенциалами средних сил взаимодействия молекулы в положении x с двумя соседними ячейками (слева и справа), получим

$$\hat{F}_{11}(x) = \frac{n_a}{Q}\, e^{-(\varphi(x)+\varphi(-x))} = \frac{n_a}{Q} f(x)\cdot f(-x) = \frac{n_a}{Q}(Ae^{-\alpha x-\beta x^2}+B)(Ae^{\alpha x-\beta x^2}+B) =$$

$$= \frac{n_a}{Q}(B^2 + BAe^{-\alpha x-\beta x^2} + ABe^{\alpha x-\beta x^2} + A^2 e^{-2\beta x^2}). \qquad (8)$$

В данном случае нормирующий множитель Q имеет следующий вид:

$$Q = \int_{\omega} f(x) f(-x)\, dx = \hat{A}^2 R_0 + B\grave{A}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\, e^{\frac{\alpha^2}{4\beta}} + A\hat{A}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\, e^{\frac{\alpha^2}{4\beta}} + \grave{A}^2\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} =$$
$$= \hat{A}^2 R_0 + 2B\grave{A}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}\, e^{\frac{\alpha^2}{4\beta}} + \grave{A}^2\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}. \qquad (9)$$

После подстановки (9) в (8) получим

$$\hat{F}_{11}(x) = n_a (C_1 + C_2 e^{\alpha x - \beta x^2} + C_2 e^{-\alpha x - \beta x^2} + C_3 e^{-2\beta x^2}), \qquad (10)$$

где

$$\tilde{N}_1 = \frac{\hat{A}^2}{Q}, \quad \tilde{N}_2 = \frac{B\grave{A}}{Q} = \frac{\grave{A}\hat{A}}{Q}, \quad \tilde{N}_3 = \frac{\grave{A}^2}{Q}. \qquad (11)$$

Таким образом, в модифицированном за счет учета вкладов от подсистемы вакансий приближении Гаусса одночастичная функция состоит из суммы четырех вкладов, что существенно отличает ее от формулы (4), полученной в приближении Гаусса. Видно, что помимо четвертого слагаемого, соответствующего приближению Гаусса (если положить B=0), присутствует слагаемое в виде константы (C_1=B^2/Q). Оно связано с вкладом от микросостояний, когда в левой и правой ячейках нет реальных молекул, т.е. там находятся вакансии, которые в развиваемой статистической схеме рассматриваются как ячейки, занятые квазичастицами. Эти фиктивные частицы сорта b не взаимодействуют между собой и с реальными молекулами. Именно по этой причине вклад от таких микросостояний имеет вид константы. Второе и третье слагаемые учитывают вклады от взаимного влияния системы реальных молекул и подсистемы вакансий. Эти перекрестные эффекты пропорциональны малому параметру B, который, согласно (5), пропорционален концентрации вакансий (для пары ячеек числа заполнения $n_{ab} \approx n_b = 1 - n_a$).

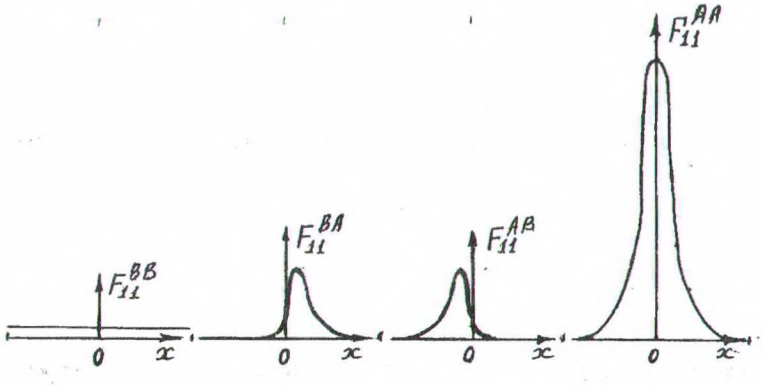

Рис. Парциальные вклады $F_{11}^{AA}(x)$, $F_{11}^{AB}(x)$, $F_{11}^{BA}(x)$ и $F_{11}^{BB}(x)$,определяющие одночастичную коррелятивную функцию для кристалла с вакансиями

На рис. схематично (без соблюдения масштабов) изображены парциальные вклады в $F_{11}(x)$, соответствующие четырем слагаемым в выражении (10). Видно, что функция $F_{11}(x)$ получает хотя и малые, но в принципиальном смысле существенные добавки, которые деформируют функцию Гаусса и создают отличную от нуля плотность ве-

роятности обнаружения молекулы на границе своей ячейки. Именно эта величина обеспечивает возможность перемещения частиц из ячейки в ячейку, что и реализуется в процессе самодиффузии. Можно предположить, что с помощью модифицированного приближения Гаусса будет возможно оценить отношение времени "оседлой жизни" молекулы в окрестности узла решетки, тогда функция распределения определяется четвертым слагаемым в (10) к промежутку времени, когда узел не занят (первое слагаемое из (10)).

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. д-ра физ.-мат. наук. – С.П.: С.Пб.ГУ, 1993. – С. 242.
2. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. Т.1. – М.: ТОО "ЯНУС", 1995.
3. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.
4. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.: Гостехиздат, 1946.
5. Abraham F.F. On the therodynamics, structure and phase stability of the nonuniform fluid state // Physics reports. 1979. – Vol. 53. №2. – P. 93 – 156.
6. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. 2000. – Т.73, №6. – С. 1313 – 1319.
7. Наркевич И.И., Лобко С.И., Жаркевич А.В., Казаков П.П. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения – сжатия // Инженерно-физический журнал, 2002. – Т.75, № 4.
8. Наркевич И.И., Жаркевич А.В, Казаков П.П. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информатики. – Минск, 2000. Вып. IX. – С. 65 – 71.
9. Наркевич И.И. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки скоррелятивных функций многокомпонентного кристалла с дефектами // Высокочистые вещества. 1990, № 1. – С. 67 – 75.

УДК 537.622; 537.84

А.Н. Вислович, доцент; В.Н. Гаранин, студент; В.В. Бирич, студент

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СФЕРИЧЕСКИХ ТЕЛ, ВЗВЕШЕННЫХ В МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ

The expressions for the interaction forses between two spherical bodyes in magnetic fluid are derived.

На тела, взвешенные в магнитной жидкости, действуют силы магнитного происхождения, которые могут быть сравнимы с силой тяжести, а в некоторых случаях значительно превышать ее [1, 2]. Этот эффект находит применение в специфических устройствах: в магнитожидкостных подшипниках [3, 4]; в датчиках ускорения, в которых