

$P_1(x)$, $P_2(x)$ на $[x_1; 1)$ будет благоприятным в том смысле, что на этих отрезках отрицательное влияние пограничных слоев будет нейтрализовано. Это обстоятельство можно использовать для того, чтобы отрезок $[0; 1]$ покрыть совокупностью положительных $J^{(+)}$ и отрицательных $J^{(-)}$ подинтервалов пристрелки, причем таких, на которых будет нейтрализовано отрицательное влияние пограничных слоев.

Этот механизм четко прослеживается в методе множественной двусторонней пристрелки. Еще можно отметить, что обнаруженные здесь закономерности имеют место и в случае линейных граничных задач общего вида с пограничным слоем [2], а также нелинейных граничных задач, поскольку они определяются внутренней природой граничной задачи, задач Коши, длиной отрезков интегрирования и направлением интегрирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений / Пер. с англ. М., 1983.
2. Кулешова И.Ф. О численном решении граничных задач, обладающих сильной чувствительностью к изменению входных данных // Известия АН БССР, сер. физико-матем. Минск, 1986. 18с. Деп. в ВИНТИ 11.04. 2618-В86.

УДК 536.758

В. Б. Немцов, профессор;
В. В. Белов, доцент;
А. В. Кондратенко, ассистент

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

The review of the results of investigations carried out by the staff of Theoretical Mechanics Department over recent years is presented. The main field of these researches is statistical mechanics of complex systems, namely, statistical theory of viscosity of liquid crystals, statistical thermodynamics of deformation of DNA molecule, electrostatical effects of ion environment of DNA molecule and biomembranes, statistical friction theory of complex molecules.

Макроскопические свойства материи зависят не только от природы образующих ее частиц, но и от ее структуры, зачастую описываемой в терминах самоорганизующейся упорядоченности системы.

Исследованию роли позиционного порядка, характерного для простых систем, взаимодействие в которых описывается с помощью центральных сил, посвящена огромная литература. Существенный вклад в статистическую механику систем с центральным взаимодействием внесен Л.А. Роттом, разработавшим метод условных распределений [1].

Не менее важны, актуальны и привлекательны системы с ориентационным порядком, к которым принадлежат жидкие кристаллы, как термотропные, так и лиотропные. К ним относятся также молекулы ДНК и биологические мембраны. Существенно, что рассматриваемые системы образуют класс сложных систем и нетривиальны по своим статистическим свойствам.

В настоящей статье представлен ряд результатов, установленных в последние годы сотрудниками кафедры теоретической механики по неравновесной теории жидких кристаллов (раздел 1), по статистической термодинамике молекул ДНК (раздел 2), по электростатическим эффектам ионного окружения молекулы ДНК и биомембран (раздел 3), а также некоторые результаты по статистической теории коэффициентов трения сложных молекул, полученные в рамках международного сотрудничества кафедры с Институтом биофизической химии им. М. Планка (Геттинген, Германия) по проблеме вибрационной релаксации возбужденных молекул (раздел 4). При расчете коэффициентов трения используются атом-атомные динамические структурные факторы, описывающие динамическую структуру молекулы и ее окружения.

1. Статистическое описание вязкости в нематических жидких кристаллах

Жидкие кристаллы — вещества, находящиеся в мезоморфной фазе, в которой свойства жидкого состояния (текучесть) сочетаются со свойствами, присущими кристаллическому состоянию (анизотропия материальных характеристик). В нематических жидких кристаллах (НЖК) имеет место упорядоченность ориентаций молекул [2]. Широкое применение жидких кристаллов в технике, а также наличие жидкокристаллических структур в ряде биологических систем привели к необходимости создания последовательной статистической теории, описывающей материальные свойства сред с ориентационным порядком [3].

Для этой цели используется метод неравновесных ансамблей Д.Н. Зубарева [4]. Неравновесная функция распределения многочас-

тичной системы в этом подходе подчиняется уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником в правой его части и является функционалом от плотностей микроскопических переменных.

Определяющие микроскопические переменные \hat{P}_m выбираются из физического требования адекватного сокращенного описания неравновесного макроскопического состояния среды с помощью их средних значений. Среди них — плотность массы, импульса, кинетического момента и энергии, как в случае классической гидродинамики систем с вращательными степенями свободы. Дополнительными динамическими переменными, учитывающими специфику упорядоченной фазы, служат тензорный параметр порядка

$$\hat{R}_{ij}(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{2} \sum_{v=1}^N \left(c_i^v c_j^v - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^v) \quad (1)$$

и плотность малых углов поворота частиц системы [3]

$$\hat{\theta}_i(\mathbf{x}) = \sum_{v=1}^N \theta_i^v \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^v), \quad (2)$$

где \mathbf{x} и \mathbf{x}^v — радиус-векторы точки пространства и молекулы с номером v соответственно, $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^v)$ — дельта-функция Дирака.

После выбора определяющих динамических переменных и вывода их уравнений устанавливается вид дополнительных микроскопических переменных, корреляции которых определяют макроскопические свойства среды. В число дополнительных микроскопических переменных входят тензоры силовых и моментных напряжений, источники тензорного параметра порядка, угла поворота и другие величины.

Последующее усреднение уравнений движения для \hat{P}_m с помощью неравновесной функции распределения приводит к макроскопическим уравнениям движения и одновременно к материальным уравнениям.

Неравновесное усреднение уравнений приводит к уравнениям статистической гидродинамики НЖК [3, 5, 6]:

$$e_{ikl} n_k \dot{n}_l = \omega_i + \lambda_{ikl} \varepsilon_{kl} - A_{kli} v_{kl} + b_{ik} M_k^0; \quad (3)$$

$$\dot{R}_{ij} = -F_{ijkl} v_{kl} + \beta E_{ijkl} \varepsilon_{kl} + \beta A_{ijk} M_k^0; \quad (4)$$

$$\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + a'_{ijkl}\varepsilon_{kl} + E_{klj}v_{kl} - \lambda_{kij}M_k^0. \quad (5)$$

В этих уравнениях τ_{ij} — тензор напряжений; P — давление;

M_k^0 — квазиравновесное значение объемной плотности момента пары сил; v_{ij} — термодинамический параметр, сопряженный R_{ij} ;

$$\varepsilon_{ij} = \nabla_j v_i - \omega_k e_{kij}.$$

В приближении стремящихся к нулю волновых векторов, рассматриваемом в этой работе, тензоры a'_{ijkl} , E_{klj} , λ_{ijk} , A_{ijk} , F_{ijkl} и b_{ij} выражаются формулами типа Грина-Кубо [3, 5–7] через полные потоки микроскопического тензора напряжений, микроскопических источников тензорного параметра порядка и малого угла поворота. Структура этих материальных тензоров дается одноосной симметрией НЖК, представляемой группой $D_{\infty h}$, что определяет количество независимых коэффициентов каждого тензора. С учетом этой структуры тензор вязких напряжений для несжимаемого НЖК может быть представлен в форме Эриксона—Лесли, принятой при феноменологическом описании реологических свойств нематика [2, 3]:

$$\sigma_{ij} = \alpha_1 n_i n_j n_k n_l e_{kl} + \alpha_4 e_{ij} + \alpha_5 n_k n_j e_{ki} + \alpha_6 n_k n_i e_{kj} + \alpha_2 n_j N_i + \alpha_3 n_i N_j, \quad (6)$$

причем при статистическом описании коэффициенты вязкости α_i уже не являются параметрами теории, а определяются через независимые коэффициенты материальных тензоров, имеющих статистическое определение [3, 5–7]. Эти выражения имеют сложную структуру, связанную с нетривиальным взаимодействием кинетики тензорного параметра порядка и директора с гидродинамическим течением среды.

В общем случае коэффициенты вязкости, полученные на основе статистической теории, зависят от частоты, что обусловлено релаксацией тензорного параметра порядка [3, 8]. Здесь коэффициенты вязкости рассматриваются в низкочастотном приближении $\omega \rightarrow 0$.

Для статистического вычисления коэффициентов вязкости следует привлечь кинетическое уравнение для расчета временных корреляционных функций, определяющих материальные тензоры. Обычно в качестве такого уравнения берется уравнение Фоккера—Планка [3, 9–12]. В работах [11, 12] общий вид выражений для коэффициентов вязкости определяется используемым уравнением. В нашем подходе выражения для коэффициентов вязкости НЖК, полученные методом неравновесного статистического оператора, в полной мере учитывают

взаимодействие кинетики ориентационного порядка и гидродинамического течения НЖК и являются точными.

В качестве кинетического уравнения для расчета упомянутых ВКФ можно привлечь также релаксационное уравнение для тензорного параметра порядка [8]

$$\frac{d}{dt} \delta R_{ij} = - \sum_{\alpha=1}^3 \tau_{\alpha}^{-1} B_{ijkl}^{(\alpha)} \delta R_{kl} \quad (7)$$

(τ_{α} - времена релаксации тензорного параметра порядка), с помощью которого выводится уравнение эволюции ВКФ тензорного параметра порядка

$$g_{ijkl}(t) = V^{-1} \iint dx dx' \langle \delta \hat{R}_{ij}(\mathbf{x}, t) \delta \hat{R}_{kl}(\mathbf{x}', 0) \rangle, \quad (8)$$

играющее важную роль в теории НЖК. Решение этого уравнения имеет вид

$$g_{ijkl}(t) = \sum_{\alpha=1}^3 g_{\alpha}(0) e^{-t/\tau_{\alpha}} B_{ijkl}^{(\alpha)}, \quad (9)$$

где $g_{\alpha}(0)$ — независимые коэффициенты СКФ тензорного параметра порядка.

Чтобы использовать уравнение (9) для расчета ВКФ, определяющих материальные тензоры, последние с помощью определений полных потоков микроскопических источников выражаются через ВКФ тензорного параметра порядка и тензор коэффициентов вращательной самодиффузии [7, 13].

При этом прямое вычисление тензора E_{ijkl} сталкивается с трудностями, связанными с тем, что определяющая его ВКФ является нечетной функцией относительно обращения времени. Поэтому для этого тензора было найдено другое выражение [14]:

$$E_{ijkl} = D_{ijmn} B_{mnlk}, \quad (10)$$

где

$$B_{ijkl} = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} dt e^{-\omega t} \langle R_{ij}(t) T_{kl}(0) \rangle; \quad (11)$$

$$D_{ijmn} = \sum_{\alpha=1}^3 (\tau_{\alpha}^{-1} + i\omega) B_{ijmn}^{\alpha}. \quad (12)$$

В качестве микроскопического тензора напряжений используется выражение Кузуу–Дои [11], с помощью которого эта величина представляется как функция тензорного параметра порядка системы.

Построенный метод вычисления реологических свойств НЖК позволяет выразить коэффициенты вязкости этих сред через молекулярные параметры (размеры молекул, параметры межмолекулярного взаимодействия) и скалярный параметр порядка S . На основании приведенной в данной работе процедуры в приближении среднего поля [2, 3] получаются выражения для коэффициентов вязкости, позволяющие провести сравнение этих величин с экспериментальными данными, в качестве которых взяты измерения коэффициентов вязкости для одного из самых изученных нематогенов МББА [15].

На рис. 1 и 2 показана температурная зависимость коэффициента α_4 , характеризующего сдвиговую вязкость, и коэффициента вращательной вязкости γ_2 соответственно. Сплошная линия представляет расчетную зависимость по рассмотренному в настоящей работе методу, черные квадраты — экспериментальные результаты, обработанные по методу наименьших квадратов; $\Delta T = T - T_c$ — отклонение температуры среды от температуры точки НЖК T_c .

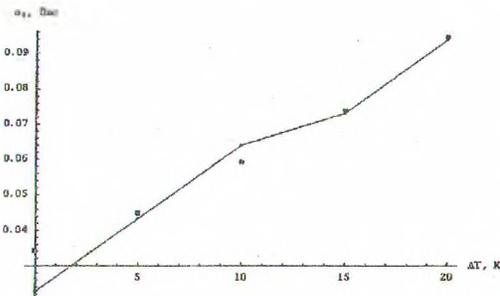


Рис. 1. Зависимость коэффициента сдвиговой вязкости α_4 от температуры

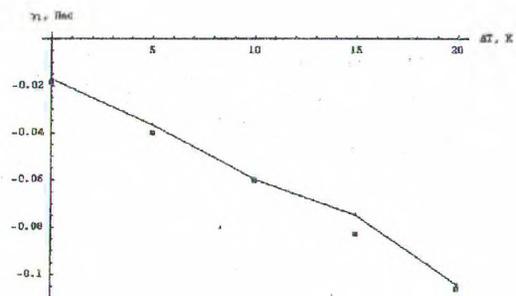


Рис. 2. Зависимость коэффициента вращательной вязкости γ_2 от температуры

Существенный интерес представляет тот факт, что расчетные значения коэффициента сдвиговой вязкости α_4 близки к опытным данным. В подходе, основанном на уравнении Фоккера — Планка, который используется в настоящее время для описания вязкости НЖК [12, 16], упомянутые величины отличаются на порядок, что объясняется сильным влиянием на этот коэффициент изотропного вклада в сдвиговую вязкость нематика [16]. Однако из рис. 1 видно, что последовательный учет всех процессов, формирующих коэффициенты вязкости

НЖК, позволяет получить значения α_4 , согласованные по величине с экспериментом.

2. Термодинамическое описание термохимических механизмов деформации молекулы ДНК

Проблема укладки молекулы ДНК в клетку является очень актуальной, так как ее длина гораздо больше диаметра типичной клетки. При решении этой проблемы используется модель молекулы ДНК в виде упругого стержня с жидкокристаллической внутренней структурой [17], что позволяет применить разработанную ранее теорию ориентационной деформации жидких кристаллов [3, 18].

Вводя три единичных вектора e_1 , e_2 и e_3 , жестко связанных с плоскостью каждой пары оснований, сформируем локальную ортонормированную систему координат. Векторы e_1 и e_2 лежат в плоскости пары оснований так, что e_1 параллелен короткой оси пары оснований, e_2 перпендикулярен вектору e_1 и параллелен длинной оси пары, а вектор e_3 перпендикулярен предыдущим двум и указывает направление вдоль оси двойной спирали молекулы ДНК. Этот вектор лежит на касательной к оси упругого стержня.

Если ввести вектор Ψ малого взаимного поворота двух соседних локальных систем координат, тогда деформацию стержня можно описать псевдовектором [19] $\Omega = d\Psi/ds$, где ds — это расстояние между указанными системами, измеренное вдоль оси стержня.

Вектор Ω можно разложить по ортогональному базису e_1 , e_2 и e_3 :

$$\Omega = \Omega_1 e_1 + \Omega_2 e_2 + \Omega_3 e_3, \quad (13)$$

так что компоненты Ω_1 и Ω_2 являются компонентами кривизны, а Ω_3 — компонентой кручения стержня. Следовательно, вектор Ω является вектором кривизны-кручения.

В соответствии с жидкокристаллической моделью ориентационная деформация в одномерном случае упругого стержня описывается вектором

$$\gamma_m = \frac{1}{2} e_{ml} \alpha_{lk} \frac{d\alpha_{tk}}{ds}, \quad (14)$$

где ортогональная матрица поворота α_{ij} связывает локальную систему координат e_1 , e_2 , e_3 с глобальной лабораторной системой.

Учитывая, что $\alpha_{i1} = e_{1i}$, $\alpha_{i2} = e_{2i}$ и $\alpha_{i3} = e_{3i}$, вектор γ можно представить в виде

$$\gamma = \Omega_1 \mathbf{e}_1 + \Omega_2 \mathbf{e}_2 + \Omega_3 \mathbf{e}_3 = \Omega. \quad (15)$$

Следовательно, жидкокристаллическое описание ориентационной деформации совпадает с классическим описанием деформации упругого стержня.

Начальные изгиб и кручение представляются вектором

$$\gamma^0 = \Omega^0_1 \mathbf{e}_1 + \Omega^0_2 \mathbf{e}_2 + \Omega^0_3 \mathbf{e}_3 = \Omega, \quad (16)$$

причем Ω^0_1 и Ω^0_2 — компоненты кривизны молекулы ДНК в ее состоянии перед деформацией, Ω^0_3 — начальное кручение $\Omega^0_3 = 2\pi/p_0$, где p_0 — шаг спирали.

Соответствие классического описания деформации молекулы ДНК как упругого стержня и описания ее деформации как жидкокристаллической структуры позволяет использовать теорию упругих деформаций жидких кристаллов для анализа упругих свойств и термодинамических функций молекулы ДНК.

Например, когда молекула ДНК подвергается деформации в поперечном сечении, возникают изгибающие M_1 , M_2 и крутящий M_3 моменты, которые удовлетворяют материальному уравнению

$$M_i = K_{ij} (\gamma_j - \gamma_j^0), \quad (17)$$

где K_{ij} — тензор модулей упругости стержня (тензор его коэффициентов жесткости на изгиб и кручение), имеющий 4 независимые компоненты.

Рассмотрим термодинамические функции закрученного стержня, моделирующего молекулу ДНК, находящейся в многокомпонентной среде.

Свободная энергия упругого стержня f , отнесенная к единице его длины, имеет вид

$$f = f_0(T, c_\alpha) + \frac{1}{2} M_i (\gamma_j - \gamma_j^0), \quad (18)$$

где T — температура; c_α — молярная концентрация катиона с номером α на единицу объема.

Для дифференциала свободной энергии справедливо соотношение

$$df = M_i d\gamma_i - SdT + \sum \mu_\alpha dc_\alpha, \quad (19)$$

в котором S — энтропия единицы длины стержня; μ_α — химический потенциал компонента α

$$\mu_{\alpha} = \left(\frac{\partial f}{\partial c_{\alpha}} \right)_{\gamma_i, T, c_{\beta}}; \quad (20)$$

суммирование в последнем члене соотношения (19) производится по всем компонентам среды, в которой находится молекула ДНК.

Рассмотрим линейную плотность термодинамического потенциала Гиббса $\varphi = f - M_i \gamma_i$. Дифференциал его определяется как

$$d\varphi = -\gamma_i dM_i - SdT + \sum \mu_{\alpha} dc_{\alpha}. \quad (21)$$

Отсюда следуют соотношения

$$\begin{aligned} \gamma_i &= -(\partial\varphi / \partial M_i)_{P, T, c_{\alpha}, M_{k \neq i}}, \quad S = -(\partial\varphi / \partial T)_{P, M_i, c_{\alpha}}; \\ \mu_{\alpha} &= (\partial\varphi / \partial c_{\alpha})_{P, M_i, c_{\beta \neq \alpha}, T}, \quad \partial\mu_{\alpha} / \partial M_i = -(\partial\gamma_i / \partial c_{\alpha}), \end{aligned} \quad (22)$$

где P — давление. Если химический потенциал μ_{α} рассматривать как функцию M_i , T и c_{β} , тогда его дифференциал подчиняется соотношению, записанному с учетом соотношений (22)

$$d\mu_{\alpha} = -(\partial\gamma_i / \partial c_{\alpha}) dM_i + (\partial\mu_{\alpha} / \partial T) dT + \sum_{\beta} (\partial\mu_{\alpha} / \partial c_{\beta}) dc_{\beta}. \quad (23)$$

Приращение химического потенциала, в свою очередь, может быть записано в форме

$$\Delta\mu_{\alpha} = -(\partial\gamma_i / \partial c_{\alpha}) M_i + (\partial\mu_{\alpha} / \partial T) \Delta T + \sum_{\beta} (\partial\mu_{\alpha} / \partial c_{\beta}) \Delta c_{\beta}, \quad (24)$$

где $\Delta T = T - T_0$, $M_i^0 = 0$.

Интересно отметить, что при $P = \text{const}$, $T = \text{const}$ и $\mu_{\alpha} = \text{const}$ из уравнения (24) следует важное соотношение

$$(\partial\gamma_i / \partial c_{\alpha}) M_i = \sum_{\beta} (\partial\mu_{\alpha} / \partial c_{\beta}) \Delta c_{\beta}, \quad (25)$$

которое означает, что изгибающие и крутящие моменты в поперечных сечениях стержня в указанных выше условиях могут появляться в результате изменения концентрации компонент среды, в которой пребывает молекула ДНК.

Соотношение (25), установленное на основании строгого термодинамического подхода, описывает механо-химический эффект деформирования молекулы ДНК.

По аналогии с тепловыми коэффициентами расширения α_{ij} для твердых тел [19] и тепловыми коэффициентами β_{ij} для холестерических жидких кристаллов [3] введем вектор тепловых коэффициентов изгиба и кручения

$$\beta = \left(\frac{\partial \Omega^0}{\partial T} \right)_{P, M}, \quad (26)$$

а его компонента β_3 , согласно [3], может быть записана как

$$\beta_3 = -\frac{2\pi}{p_0^2} \left(\frac{\partial p_0}{\partial T} \right)_{P, M}. \quad (27)$$

Величина β отнесена к начальному равновесному состоянию.

Как показано в [17], увеличение энтропии молекулы ДНК может быть записано в виде ($M^0 = 0$)

$$\Delta S = \beta_1 M_1 + \beta_2 M_2 + \beta_3 M_3 + c_p \frac{\Delta T}{T_0}, \quad (28)$$

где c_p — теплоемкость; T_0 — температура начального недеформированного состояния. Добавочное изменение энтропии, вызванное изгибом хирального стержня, определяется первыми двумя слагаемыми соотношения (28). Третье слагаемое описывает вклад деформации кручения и было рассмотрено ранее [3].

Производство теплоты благодаря изгибу хирального стержня может быть записано как

$$\Delta Q = T_0 \Delta S = T_0 (\beta_1 M_1 + \beta_2 M_2). \quad (29)$$

Соотношения (28) и (29) описывают новый калорический эффект, возникающий благодаря изгибу стержня с хиральной симметрией.

Для определения ΔQ и ΔS требуется найти выражения для β_1 и β_2 .

Напомним, что компоненты кривизны Ω_1 и Ω_2 можно представить следующим образом:

$$\Omega_1 = d\Psi_1/ds(T), \quad \Omega_2 = d\Psi_2/ds(T), \quad (30)$$

где Ψ_1 и Ψ_2 — соответствующие углы и $ds = ds_0(1 + \alpha \Delta T)$; α — линейный тепловой коэффициент расширения. Следовательно,

$$\beta_1 = \left(\frac{\partial \Omega_1^0}{\partial T} \right)_{T=T_0} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{d\Psi_1}{ds_0(1+\alpha\Delta T)} \right)_{T=T_0} = -\frac{d\Psi_1}{ds_0} \alpha = -\Omega_1^0 \alpha \quad (31)$$

и аналогично

$$\beta_2 = -\Omega_2^0 \alpha. \quad (32)$$

Изгибающие моменты M_1 и M_2 определяются соотношениями

$$M_1 = K_{11}(\Omega_1 - \Omega_1^0), \quad M_2 = K_{22}(\Omega_2 - \Omega_2^0). \quad (33)$$

Для оценки нового калорического эффекта будем использовать выражение для изгибающего момента, отнесенного к одной паре оснований в следующей простой форме:

$$M = g_b h^2 (\Omega - \Omega^0), \quad (34)$$

где h – расстояние между ближайшими парами оснований, а жесткость на изгиб g_b – это силовая постоянная, отнесенная к молю вещества, которая может быть выражена через персистентную длину a :

$$g_b = RT_0 a / h, \quad (35)$$

где R – газовая постоянная.

Рассмотрим распрямление молекулы ДНК, предполагая, что в начальный момент времени она представляла собой окружность радиуса r_0 . В этом случае $\Omega = 0$, $\Omega_0 = r_0^{-1}$ и с помощью соотношений (30) — (32), (34) и (35) ΔQ можно записать в виде

$$\Delta Q = T_0 \alpha g_b h^2 \Omega_0^2 = T_0 \alpha R a h r_0^{-2}. \quad (36)$$

Если $a = 500 \text{ \AA}$, $T_0 = 300 \text{ K}$, $h = 3.4 \text{ \AA}$, $r_0 = 50 \text{ \AA}$, $\alpha = 4 \cdot 10^{-2} \text{ K}^{-1}$, тогда $\Delta Q = 2.03 \cdot 10^4 \text{ Дж/моль}$.

Для сравнения дадим оценку новому калорическому эффекту, вызванному крутящим моментом при раскрутке молекулы ДНК.

Энтропия и теплота раскрутки молекулы ДНК дается выражением

$$\Delta S = \beta_3 M_3, \quad \Delta Q = T_0 \Delta S, \quad (37)$$

где

$$\beta_3 = -\frac{2\pi}{p_0^2} \frac{\partial p_0}{\partial T}, \quad M_3 = g_t h^2 (\gamma_3 - \gamma_3^0), \quad \gamma_3^0 = \frac{2\pi}{p_0}, \quad (38)$$

а g_t – жесткость на кручение.

Коэффициент β_3 может быть представлен через линейный тепловой коэффициент расширения α :

$$\beta_3 = -\frac{2\pi}{p_0} \alpha. \quad (39)$$

Тогда энтропия раскрутки и соответствующая теплота при $\gamma_3 = 0$ имеют вид

$$\Delta S = \frac{8\pi^2}{p_0^2} \alpha g_t h^2, \quad \Delta Q = T_0 \Delta S. \quad (40)$$

Для типичных значений: если $g_t = 1.53RT_0$, $T_0 = 300\text{K}$, $p_0 = 34\text{\AA}$, $h = 3.4\text{\AA}$, $\alpha = 3.4 \cdot 10^{-2} \text{K}^{-1}$, получим $\Delta S = 117 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{K})$, $\Delta Q = 3.53 \cdot 10^4 \text{ Дж}/\text{моль} = 8.42 \text{ ккал}/\text{моль}$. Экспериментальное значение ΔQ лежит в диапазоне 7–9 ккал/моль [20]. Здесь мы использовали оценку коэффициента теплового расширения α , которая была дана ранее [3, 21].

3. Электростатические эффекты в молекулах ДНК и биомембранах

Для рассмотрения электростатических эффектов в молекулах ДНК и биологических мембранах используются простые модели (см. [22,23]), согласно которым ДНК представляет собой бесконечно длинный, равномерно отрицательно заряженный цилиндр радиуса a , а мембрана – бесконечную, равномерно отрицательно заряженную плоскость с поверхностной плотностью заряда ρ_s , помещенные в бесконечную среду с постоянной диэлектрической проницаемостью ϵ . В объеме находятся подвижные ионы с равными по величине зарядами противоположного знака, концентрации которых одинаковы (раствор соли типа NaCl). Подлежащими определению характеристиками таких систем являются равновесные электростатический потенциал цилиндра и плоскости ψ и плотности распределения положительно и отрицательно заряженных частиц в их окрестности. Эти характеристики связаны между собой уравнением Пуассона

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left\langle \sum_{i=1}^N e_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\rangle, \quad (41)$$

где N - число частиц; e - заряд частицы; $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ - δ - функция Дирака; \mathbf{r}_i -радиус-вектор, определяющий положение i -го иона; угловые скобки означают статистическое усреднение. В зависимости от того, какие предположения или приближения используются при выполнении такого усреднения, получаются различные варианты уравнения (41) (см. [22] и цитируемую там литературу), наибольшую популярность из которых приобрело так называемое уравнение Пуассона-Больцмана. Оно получается в предположении, что заряженные частицы находятся во внешнем поле ψ и не коррелируют между собой, то есть подчиняются бoльцмановскому распределению, и это снимает многие проблемы, связанные с дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия ионов.

В данной работе используется иной подход [24], когда усреднение в (41) осуществляется по каноническому ансамблю заряженных частиц, находящихся во внешнем поле ψ , то есть

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{l} \cdots \int_V dN \sum_{i=1}^N e_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) Q_N^{-1} \exp[-\beta(U_N + \psi_N)] \quad (42)$$

Здесь

$$U_N = \Phi_N^s + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e_i e_j}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left\{ \Phi^s(i, j) + \Phi^c(i, j) \right\} \quad (43)$$

- потенциальная энергия короткодействующего Φ^s и кулоновского Φ^c взаимодействия частиц, когда растворитель учитывается только с помощью диэлектрической проницаемости;

$$\psi_N = \sum_{i=1}^N e_i \psi(\mathbf{r}_i) \quad (44)$$

- потенциальная энергия частиц во внешнем поле;

$$Q_N = \int_V d\mathbf{l} \cdots \int_V dN \exp[-\beta(U_N + \psi_N)] \quad (45)$$

– конфигурационный интеграл.

Интегрирование гиббсовской функции $\exp[-\beta(U_N + \psi_N)]$ по каким-либо переменным приводит, как известно [25], к частичным функциям распределения $F_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$, для которых могут быть выбраны различные и, вообще говоря, неэквивалентные представления. В одном из них, предложенном в работе [26] и используемом в дальнейшем изложении, одночастичные функции имеют вид

$$F_\mu(i) = Q_\mu^{-1} \exp\left\{-\beta[\varphi_\mu(i) + \psi_\mu(i)]\right\}, \quad (46)$$

где индекс $\mu=1,2$ обозначает сорта частиц, $\varphi_\mu(i)$ – потенциал средней силы, являющийся результатом интегрирования гиббсовского множителя по всем переменным, кроме i -ой, а

$$Q_\mu = \int_V di \exp\left\{-\beta[\varphi_\mu(i) + \psi_\mu(i)]\right\}, \quad (47)$$

причем

$$Q_N = \prod_\lambda Q_\lambda^{N_\lambda} = \prod_\lambda \left\{ \int_V di \exp\left[-\beta(\varphi_\lambda(i) + \psi_\lambda(i))\right] \right\}^{N_\lambda}. \quad (48)$$

N_λ – число частиц сорта λ .

Будем рассматривать совокупность ионов как симметричную двухкомпонентную систему, в которой числа положительно и отрицательно заряженных частиц одинаковы. Осуществим интегрирование в правой части выражения (42), воспользовавшись введенными выше функциями распределения, и после перехода к термодинамическому пределу будем иметь

$$\rho(\mathbf{r}) = \text{рес} \left\{ \exp\left[-\beta(\varphi_p(\mathbf{r}) + e\psi(\mathbf{r}))\right] - \exp\left[-\beta(\varphi_n(\mathbf{r}) - e\psi(\mathbf{r}))\right] \right\}. \quad (49)$$

В дальнейшем величины, относящиеся к положительно заряженной компоненте, будем снабжать символом p , а к отрицательной – символом n . Уравнение (41), таким образом, принимает вид

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi\text{рес}}{\varepsilon} \left\{ \exp\left[-\beta(\varphi_p(\mathbf{r}) + e\psi(\mathbf{r}))\right] - \exp\left[-\beta(\varphi_n(\mathbf{r}) - e\psi(\mathbf{r}))\right] \right\}. \quad (50)$$

Если положить $\varphi_p = \varphi_n = 0$, получим то, что называется уравнением Пуассона-Больцмана.

Граничные условия для этих уравнений определяются, во-первых, требованием обращения потенциала ψ в нуль на бесконечности и, во-вторых, наличием информации о поверхностной плотности заряда источника внешнего поля, которая связана с нормальной производной от потенциала [27], то есть

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{r=a} = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \rho_s, \quad \psi|_{r \rightarrow \infty} = 0 \quad (51)$$

для молекулы ДНК и

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_{z=0} = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \rho_s, \quad \psi|_{z \rightarrow \infty} = 0 \quad (52)$$

для мембраны (r - расстояние от оси цилиндра, ось перпендикулярна поверхности мембраны).

Решить, однако, уравнение (50) при граничных условиях (51), (52) нельзя, поскольку они не являются замкнутыми: в правой части содержатся потенциалы φ , относящиеся к ионной системе, и для них нужны дополнительные уравнения. Их можно получить из интегральной связи между одно- и двухчастичными функциями распределения

$$F_\mu(1) = \sum_{\nu=1}^2 c_\nu \int_V d2 F_{\mu\nu}(1,2) \quad (53)$$

с помощью процедуры, подробно описанной в [26], которая приводит к следующему:

$$w_p(1) = \rho c \int d2 \left\{ e^{w_p(2)-u(2)} h_{pp}(1,2) + e^{w_n(2)+u(2)} h_{pn}(1,2) \right\}, \quad (54)$$

$$w_n(1) = \rho c \int d2 \left\{ e^{w_p(2)-u(2)} h_{pn}(1,2) + e^{w_n(2)+u(2)} h_{nn}(1,2) \right\}. \quad (55)$$

Здесь $w = \beta\varphi$, $u = \beta e\psi$,

$$h_{\mu\nu}(1,2) = \exp \left\{ -\beta \Phi_{\mu\nu}^s(1,2) + \Omega_{\mu\nu}(1,2) \right\} - 1. \quad (56)$$

Уравнения (50), (54), (55) образуют замкнутую систему при условии, что величины Ω известны. Последние должны определяться

уравнениями, содержащими трехчастичные функции распределения для неоднородного случая, конкретный вид которых неизвестен. Поэтому в качестве первого приближения для Ω использовалось представление

$$\Omega_{pp}(r) = \Omega_{nn}(r) = \frac{\beta e^2}{\varepsilon} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad \Omega_{pn}(r) = -\Omega_{pp}(r), \quad (57)$$

которое, как показали численные эксперименты, достаточно хорошо описывает ионную систему в однородном случае [28] для рассматриваемых здесь концентраций.

На рис. 3 и 4 изображены напряженности электростатических полей цилиндра и мембраны как функции расстояния от их поверхностей для трех значений концентрации ионов в моль/литр (1: $c = 0.01$, 2: $c = 0.1$, 3: $c = 1.0$).

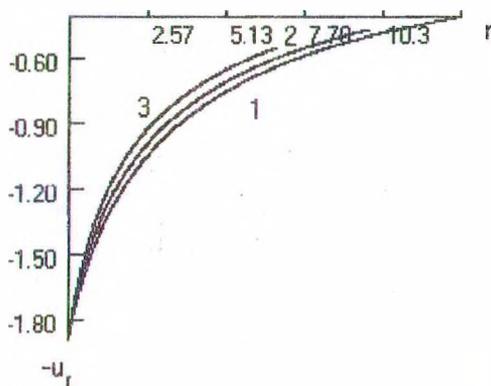


Рис. 3. Зависимость напряженности электрического поля цилиндра от расстояния

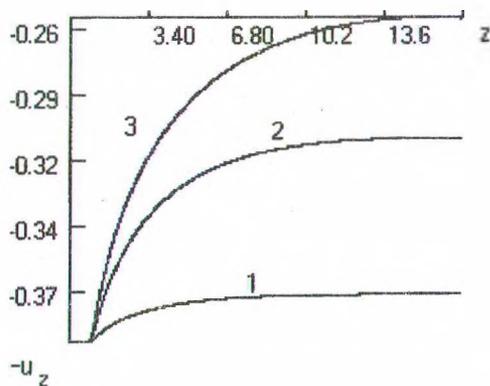


Рис. 4. Зависимость напряженности электрического поля мембраны от расстояния

На рис. 5 и 6 представлены функции распределения плотности числа положительных (рис. 5) и отрицательных (рис. 6) ионов в окрестности молекулы ДНК, аналогичный вид они имеют и для мембраны.

С помощью установленной пространственной зависимости напряженности поля был рассчитан электростатический вклад в свободные энергии молекулы ДНК и биомембраны и определены их упругие характеристики. На рис. 7 (ДНК) и 8 (биомембрана) представлены результаты расчетов модулей упругости в безразмерном виде при температуре $T=300^\circ\text{C}$ в зависимости от концентрации ионов. Кривые 1 соответствуют результатам, полученным с помощью указанной выше системы уравнений, а кривые 2 — с помощью уравнения Пуассона-

Больцмана. Здесь E — модуль продольной упругости, а K — модуль упругости при изгибе мембраны.

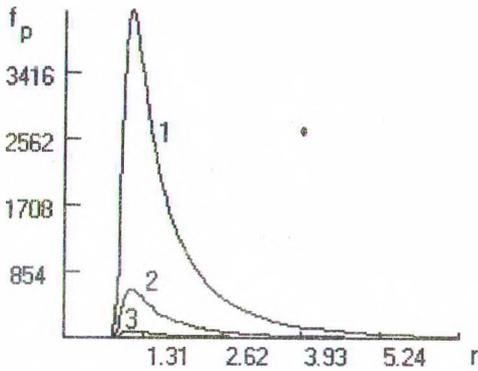


Рис. 5. Зависимость функции распределения плотности числа положительных ионов в окрестности молекулы ДНК от расстояния

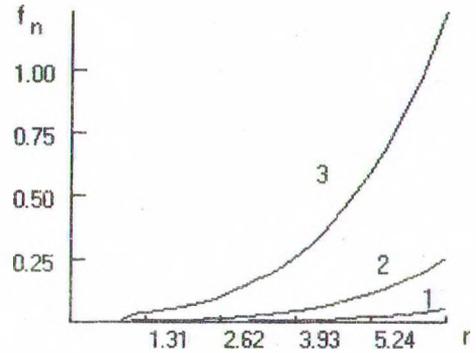


Рис. 6. Зависимость функции распределения плотности числа отрицательных ионов в окрестности молекулы ДНК от расстояния

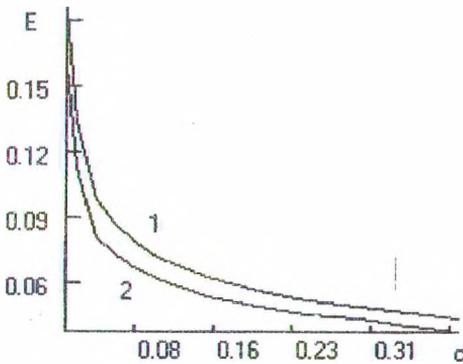


Рис. 7. Зависимость модуля продольной упругости молекулы ДНК от концентрации

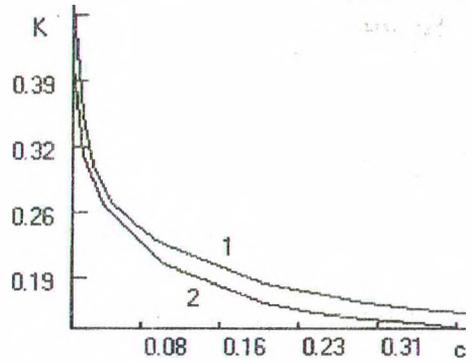


Рис. 8. Зависимость функции распределения плотности числа отрицательных ионов в окрестности молекулы ДНК от расстояния

4. Статистическая теория коэффициентов трения сложных молекул

Получим общее выражение для коэффициентов трения, выраженных через структурный фактор [29].

Для этого рассмотрим выражения для тензоров трения:

$$\zeta_{\alpha\alpha}(\omega) = \beta \int_0^{\infty} \langle \mathbf{B}^{\alpha}(t) \mathbf{B}^{\alpha}(0) \rangle e^{i\omega t} dt,$$

$$\zeta_{\alpha\beta}(\omega) = \beta \int_0^{\infty} \langle \mathbf{B}^{\alpha}(t) \mathbf{B}^{\beta}(0) \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (58)$$

В нашем случае мы рассматриваем корреляции между силами \mathbf{B}^{α} и \mathbf{B}^{β} , действующими на разные атомы α и β со стороны молекул растворителя.

Обозначим γ и δ номера атомов в молекулах растворителя, имеющих номера i и j . Тогда $\mathbf{B}^{\alpha} = \sum_{i,\gamma} \mathbf{B}(|\mathbf{r}_{\alpha\gamma i}|)$ — сила, действующая на атом α со стороны атома γ , принадлежащего молекуле растворителя. Здесь $\mathbf{r}_{\alpha\gamma i}$ — вектор между атомами α и γ . Следует отметить, что индекс α может рассматриваться как индекс вибрационной моды возбужденной молекулы. Тогда \mathbf{B}^{α} должна рассматриваться как релевантная обобщенная сила.

Вычислим корреляционную функцию сил

$$f_{\alpha\alpha}(t) = \langle \mathbf{B}^{\alpha}(t) \mathbf{B}^{\alpha}(0) \rangle, \quad (59)$$

используя тождества

$$\mathbf{B}^{\alpha}(t) = \sum_{i,\gamma} \mathbf{B}(|\mathbf{r}_{\alpha\gamma i}|) = \sum_{i,\gamma} d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha\gamma i}) \mathbf{B}(|\mathbf{r}|),$$

$$\mathbf{B}^{\alpha}(0) = \sum_{j,\delta} \mathbf{B}(|\mathbf{r}_{\alpha\delta j}|) = \sum_{j,\delta} d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\alpha\delta j}) \mathbf{B}(|\mathbf{r}'|) \quad (60)$$

и микроскопические плотности числа частиц

$$\rho_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\gamma i} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\alpha}(t) - \mathbf{r}_{\gamma i}(t)),$$

$$\rho_{\alpha}(\mathbf{r}', 0) = \sum_{\delta j} \delta(\mathbf{r}' + \mathbf{r}_{\alpha}(0) - \mathbf{r}_{\delta j}(0)), \quad (61)$$

где учтено, что

$$\mathbf{r}_{\alpha\gamma i} = \mathbf{r}_{\gamma i} - \mathbf{r}_{\alpha}, \quad \mathbf{r}_{\alpha\delta j} = \mathbf{r}_{\delta j} - \mathbf{r}_{\alpha},$$

причем \mathbf{r}_{α} , $\mathbf{r}_{\gamma i}$ и $\mathbf{r}_{\delta j}$ — радиус-векторы атомов α , γi и δj относительно покоящейся лабораторной системы отсчета.

В этом случае корреляционная функция сил дается выражением

$$f_{\alpha\alpha}(t) = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \delta\rho_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \delta\rho_{\alpha}(\mathbf{r}', 0) \rangle \mathbf{B}(\mathbf{r}) \mathbf{B}(\mathbf{r}'), \quad (62)$$

где $\delta\rho = \rho(\mathbf{r}, t) - \rho_0$ — отклонение плотности от равновесного значения ρ_0 .

Но корреляция флуктуаций плотности может быть представлена через промежуточную функцию рассеяния $F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t)$:

$$\langle \delta\rho_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \delta\rho_{\alpha}(\mathbf{r}', 0) \rangle = \frac{n}{(2\pi)^3} \int F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{k}, \quad (63)$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$, \mathbf{k} — волновой вектор; $n = N/V$ — плотность частиц в растворителе; объем V растворителя содержит N молекул.

Функция $F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t)$ — это атом-атомная промежуточная функция рассеяния, так как она выражается через фурье-преобразование флуктуаций атомной плотности $\rho_{\alpha}(\mathbf{k}, t) = \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta\rho_{\alpha}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$ с помощью соотношения

$$F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t) = N^{-1} \langle \rho_{\alpha}(\mathbf{k}, t) \rho_{\alpha}(-\mathbf{k}, 0) \rangle. \quad (64)$$

Подставляя (64) в (63) и используя фурье-представление для сил $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{B}(\mathbf{r}')$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int \mathbf{B}(\mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}',$$

после некоторых простых преобразований найдем следующее теоретическое выражение для $f(t)$:

$$f_{\alpha\alpha}(t) = \frac{n}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t) \mathbf{B}(\mathbf{k}) \mathbf{B}(-\mathbf{k}). \quad (65)$$

Наконец, после применения преобразования Фурье по времени

$$f_{\alpha\alpha}(\omega) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} f_{\alpha\alpha}(t) e^{i\omega t} dt$$

получим следующий важный результат для коэффициентов трения:

$$\zeta_{\alpha\alpha}(\omega) = \beta n (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{k} S_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{B}(\mathbf{k}) \mathbf{B}(-\mathbf{k}), \quad (66)$$

где

$$S_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) = (2\pi)^{-1} \int dt F_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} \quad (67)$$

— атом-атомный динамический структурный фактор.

Аналогично рассмотрим тензор трения $\zeta_{\alpha\beta}$, учитывая корреляцию между силами, приложенными к разным (α и β) атомам молекулы растворенного вещества. В этом случае силовая корреляционная функция $f_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{V}^\alpha(t) \mathbf{V}^\beta(0) \rangle$ определяется как

$$f_{\alpha\beta} = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \langle \delta\rho_\alpha(\mathbf{r}, t) \delta\rho_\beta(\mathbf{r}', t) \rangle \mathbf{V}(\mathbf{r}) \mathbf{V}(\mathbf{r}'), \quad (68)$$

где $\delta\rho_\alpha$ и $\delta\rho_\beta$ — флуктуации микроскопических плотностей числа частиц, определяемые формулой (61). Тогда корреляция флуктуаций плотности выражается через промежуточную функцию рассеяния для разных атомов $F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$

$$\langle \delta\rho_\alpha(\mathbf{r}, t) \delta\rho_\beta(\mathbf{r}', 0) \rangle = \frac{n}{(2\pi)^3} \int F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{k}. \quad (69)$$

В свою очередь, функция $F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$ дается выражением

$$F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t) = N^{-1} \langle \rho_\alpha(\mathbf{k}, t) \delta\rho_\beta(-\mathbf{k}, 0) \rangle. \quad (70)$$

Окончательный результат для тензора трения, как в случае $\zeta_{\alpha\alpha}$, можно записать в форме

$$\zeta_{\alpha\beta}(\omega) = \beta n (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{k} S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{V}(\mathbf{k}) \mathbf{V}(-\mathbf{k}), \quad (71)$$

где

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = (2\pi)^{-1} \int dt F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t} \quad (72)$$

— атом-атомный динамический структурный фактор для разных атомов.

Представляет интерес тот факт, что в формуле (66) в коэффициенте трения вклады структуры и динамики среды отделены от вкладов, обусловленных взаимодействием возбужденных молекул со средой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. — 280 с.
2. Де Жен П.Ж. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. — 400 с.
3. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком. Мн.: Тэхналогія, 1997. — 278 с.
4. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. — 416 с.

5. Nemtsov V.B. Statistical hydrodynamics of cholesteric liquid crystals // *Physica*. 1977. V.86A. – P. 513-534.
6. Nemtsov V.B. Statistical theory of hydrodynamic and relaxation processes in liquid crystals // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1990. V.192. – P. 137-141.
7. Kondratenko A.V., Nemtsov V.B. Correlation Theory of Viscosity of Nematic Liquid Crystals // *Advances in Synergetics*. 1997. V.9. – P. 132-138.
8. Немцов В.Б. Временная корреляционная функция параметра порядка для ориентированных нематических жидких кристаллов // *Труды БТИ. Сер. IV.: Физико-математические науки*. 1993. Вып. 1. – С. 55-59.
9. Бокун Г.С., Немцов В.Б., Кондратенко А.В. Взаимодействие гидродинамических течений и средней ориентации молекул в нематических жидких кристаллах // *Труды БГТУ. Сер. IV.: Физико-математические науки*. 1996. Вып. 3. – С. 50-57.
10. Немцов В.Б., Вихренко В.С., Бокун Г.С., Кондратенко А.В. Статистические основы молекулярной гидродинамики ориентационно упорядочивающихся сред // *Тепло- и массообмен в реологических системах*. 1996. Т.6. – С. 93-100.
11. Kuzuu N., Doi M. Constitutive equations for nematic liquid crystals under weak velocity gradient derived from a molecular kinetic equation // *Journ. Phys. Soc. Jap.* 1983. V.52. – P.3486-3494.
12. Fialkowsky M. Viscous properties of biaxial nematic liquid crystals: The method of calculation of the Leslie viscosity coefficients // *Phys. Rev. E*. 1997. V.55. – P. 2902-2915.
13. Nemtsov V.B. and Kondratenko A.V. Statistical Calculation of Viscosity Coefficients of Nematic Liquid Crystals // *Advances in Synergetics*. 1997. V.8. – P. 373-379.
14. Немцов В.Б., Кондратенко А.В. Альтернативное статистическое описание взаимодействия гидродинамического потока нематика с ориентацией его молекул кристаллах // *Труды БГТУ. Сер. IV.: Физико-математические науки*. 1997. Вып. 4. – С. 23-26.
15. Diogo A.C., Martins A.F. Order parameter and temperature dependence of the hydrodynamic viscosities of nematic liquid crystals // *J. de Phys.* 1982. V.43. – P. 779-786.
16. Chrzanowska A., Sokalski K. Microscopic description of nematic liquid crystal viscosity. // *Phys. Rev. E*. 1995. V. 52. – P. 5228-5240.

17. Nemtsov V.B. Statistical theory of the elastic properties of DNA molecules // *Nonlinear phenomena in complex systems*. 1998. V.1. – P.109-113.
18. Немцов В.Б. О химической термодинамике деформирования молекул ДНК // *Труды БГТУ. Сер. IV.: Физ.-мат. науки и информатика*. 1999. Вып. VII. – С. 66-72.
19. Ландау И.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. – 380 с.
20. Веденов А.А. Физика растворов. М.: Наука, 1987. – 260 с.
21. Nemtsov V.B. // *Advances in Synergetics*. 1997. V.8. – P. 369-372.
22. Франк-Каменецкий И.Д., Аншелевич В.В., Лукашин А.В. Полиэлектrolитная модель ДНК // *УФН*, 1987, т.151, вып. 4. – С. 595-618.
23. Jahnig F. Electrostatic free energy and shift of the phase transition for charged lipid membranes // *Biophysical Chemistry*, 1976, No.4. – P.309-318.
24. Белов В.В., Немцов В.Б. Статистическое описание ионного окружения молекул ДНК и биомембран // *Труды БГТУ. Сер. IV.: Физ.-мат. науки и информатика*. 1999. Вып. VII. – С. 58-66.
25. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, Киев, 1970. Т.2.
26. Белов В.В. Новые интегральные уравнения для жидких смесей // *ДАН БССР*, 1988, т.32, № 6. – С. 500-503.
27. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
28. Белов В.В. Новые интегральные уравнения для систем с кулоновским взаимодействием // *ДАН БССР*, 1988, т.32, № 10. – С. 899-902.
29. V.B. Nemtsov, I.I. Fedchenia, A.V. Kondratenko and J. Schroeder. Density dependence of vibrational energy relaxation rates in supercritical solution: A hydrodynamic model // *Phys. Rev. E*. 1999. Vol. 60. – P. 3814-3822.