Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Н. Васильев, А. В. Кулиш, Распределение жидкости и эффективный потенциал в ограниченной системе специальной геометрии, *ТМФ*, 2010, том 163, номер 1, 156–162

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6493>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.23.180.231

26 апреля 2023 г., 17:18:28

© 2010 г.

А. Н. Васильев^{*†}, А. В. Кулиш^{*}

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЖИДКОСТИ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ В ОГРАНИЧЕННОЙ СИСТЕМЕ СПЕЦИАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Вычисляется плотность распределения жидкости, ограниченной системой коаксиальных цилиндров с заданным пристеночным потенциалом. Задача решается в рамках приближения плавной неоднородности для пристеночного потенциала произвольного типа. На основании полученного решения анализируется частный случай, когда пристеночный потенциал является существенно короткодействующим и в области действия остается постоянным внутри каждой из прослоек. Для этого случая вычисляется эффективный пристеночный потенциал, при котором распределение плотности является непрерывной функцией во всей области.

Ключевые слова: распределение плотности, пристеночный потенциал, пространственно ограниченная система.

1. ВСТУПЛЕНИЕ

В теории жидкостей важную информацию о структуре и свойствах системы получают на основе экспериментов по рассеянию нейтронов [1]–[3]. В частности, по интенсивности рассеяния нейтронов можно восстановить профиль плотности жидкости в образце, поскольку основным фактором, определяющим интенсивность рассеяния нейтронов, является характер распределения жидкости. Более того, эксперименты по рассеянию нейтронов являются базовыми в исследовании вопроса о зависимости распределения жидкости от температуры, особенно в критической области. Данная задача имеет прямое отношение к проблеме определения уравнения состояния жидкой системы и является сложной и, как известно, в общем случае не решенной. На сегодняшний день уровень экспериментальных методик и технологий позволяет достаточно точно и надежно определять профиль распределения плотности жидкости в образцах практически любой формы. Для обработки таких

^{*}Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина.
E-mail: vasilev@univ.kiev.ua

[†]Национальный технический университет Украины “КПИ”, Киев, Украина

экспериментов необходима простая и продуктивная теория. Хотя система уравнений движения для жидкости, состоящая из уравнения непрерывности, уравнения Навье–Стокса и уравнения теплопроводности (с учетом переноса вещества), является замкнутой, она содержит, кроме скорости жидкости (которая в рассматриваемом далее случае равна нулю), давление как функцию плотности и температуры. Другими словами, чтобы решить указанную систему уравнений гидродинамики, необходимо знать уравнение состояния вещества (жидкости). К сожалению, это уравнение в общем случае неизвестно. Таким образом, для восстановления по данным нейтронного рассеяния уравнения состояния жидкости (хотя бы для ограниченного диапазона температур) необходимо сделать какие-то предположения относительно этого уравнения состояния. Учитывая данное обстоятельство и тот факт, что построенное продуктивной теории жидких систем представляется задачей исключительно сложной, на практике прибегают к различного рода феноменологическим моделям, которые, с одной стороны, просты для выполнения аналитического прогнозирования свойств систем, а с другой, позволяют получать достоверные, согласующиеся с экспериментальными данными, результаты (см., например, [2], [4]).

Такой подход использован и в настоящей статье. В частности, в качестве отправной точки модели рассматривается феноменологическое выражение для добавки к свободной энергии, обусловленной неоднородностью распределения жидкости в образце и возникающей вследствие взаимодействия жидкости с ограничивающими систему поверхностями. Взаимодействие жидкости с поверхностями описывается пристеночным потенциалом (создаваемым поверхностями), который полагается известным. Задача о распределении плотности решается путем минимизации функционала с учетом дополнительного условия (неизменность общей массы жидкости в образце). Более конкретно, в настоящей статье вычисляется профиль распределения жидкости в пространственно ограниченной системе, состоящей из вложенных друг в друга коаксиальных цилиндров. Эта задача имеет прикладное значение в силу сразу нескольких причин. Во-первых, как отмечалось выше, наличие точного в рамках исходной модели решения позволяет рассчитать, при сравнении с экспериментом, ряд важных характеристик жидкой системы (таких, например, как интенсивность рассеяния нейтронов). Во-вторых, такого рода задачи актуальны с точки зрения более глобальной проблемы анализа заполнения малоразмерных систем разной геометрии жидким содержимым. Подобные проблемы возникли вместе с развитием нанотехнологий и связаны с тем, что заполнение нанопор жидким содержимым крайне усложняется из-за наличия поверхностного натяжения, которое препятствует проникновению жидкости внутрь поры. Один из способов разрешения этой технологической трудности состоит в том, что жидкость переводится в околокритическое состояние, в котором коэффициент поверхностного натяжения близок к нулю, после чего такой “почти критической” жидкостью заполняются поры.

Если речь идет о макросистемах упомянутой геометрии, когда стенки, разделяющие слои жидкости, достаточно толстые, то такая система может рассматриваться как простое, механическое объединение подсистем, ограниченных парой цилиндров соответствующих радиусов. Решение задачи о распределении жидкости в данной

системе сводится к поиску решения для жидкости, ограниченной двумя цилиндрами, с заданной формой пристеночного потенциала. Более интересной является ситуация, когда стенки цилиндров тонкие – порядка нескольких атомарных слоев. В известном смысле такие стенки можно рассматривать как наносетку. Главная особенность такой системы состоит в том, что распределение плотности жидкости должно быть непрерывным в пределах всей системы, а не только отдельной прослойки. Данную ситуацию мы рассматриваем при вычислении эффективного пристеночного потенциала.

В нашей статье сначала решается вспомогательная задача о распределении плотности жидкости между двумя коаксиальными цилиндрами под действием внешнего поля (в качестве которого затем рассматривается пристеночный потенциал, т.е. потенциал взаимодействия между ограничивающими систему стенками и жидкостью). Задача решается в предположении, что профиль плотности между коаксиальными цилиндрами искривляется (по сравнению с однородным распределением) в силу действия поля. Поскольку точное выражение для функционала свободной энергии системы неизвестно, выполняется разложение этого функционала по отклонениям плотности от среднего значения и по градиенту до второго порядка включительно. Данный подход соответствует приближению плавной неоднородности [5], [6].

Следует отметить, что метод, использованный в настоящей статье, впервые был предложен в серии работ по исследованию однокомпонентных пространственно ограниченных систем простой геометрии (плоский слой, цилиндр и сфера), находящихся под действием гравитационного поля и пристеночного потенциала определенного вида [5], [6]. Впоследствии этот метод был расширен на общий случай внешнего потенциала в многокомпонентных пространственно ограниченных системах, находящихся под действием внешнего поля [7].

2. ОГРАНИЧЕННАЯ СИСТЕМА С ГЕОМЕТРИЕЙ КОАКСИАЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ

Для начала рассмотрим вспомогательную задачу о распределении плотности однокомпонентной жидкости, ограниченной двумя коаксиальными цилиндрами радиусов R_1 и $R_2 > R_1$. В приближении плавной неоднородности выражение для части свободной энергии, обусловленной неоднородностью распределения жидкости, может быть записано следующим образом:

$$\delta\Phi = \frac{1}{2} \int_{R_1}^{R_2} (a(\delta\rho)^2 + b(\nabla\delta\rho)^2 + 2h(r)\delta\rho) r dr, \quad (1)$$

где $\delta\rho(r)$ определяет отклонение плотности от среднего значения, a и b – феноменологические параметры модели, $h(r)$ – потенциал внешнего поля: в данном случае это результат совместного действия пристеночного потенциала каждого из цилиндров. Как отмечалось выше, выражение (1) является, фактически, общепринятым разложением до второго порядка свободной энергии по отклонению плотности и ее градиента при условии малости отклонений плотности от однородного распределения [5]–[7].

Задача состоит в поиске минимума функционала (1), однако при этом необходимо учесть дополнительное ограничение

$$\int_{R_1}^{R_2} \delta \rho \cdot r \, dr = 0, \quad (2)$$

которое является следствием постоянства массы жидкости в системе при перераспределении ее плотности. Таким образом, необходимо решить изопериметрическую задачу, которая сводится к решению уравнения

$$b\Delta\delta\rho - a\delta\rho = h(r) + \lambda$$

с граничными условиями (возникающими при решении задачи минимизации функционала)

$$\left. \frac{d\delta\rho}{dr} \right|_{r=R_1} = \left. \frac{d\delta\rho}{dr} \right|_{r=R_2} = 0$$

при дополнительном ограничении (2) – неизвестный параметр λ ищется с учетом этого условия.

Несложно показать, что параметр λ определяется соотношением

$$\lambda = -\frac{1}{\pi(R_2^2 - R_1^2)} \int_{R_1}^{R_2} h(r)r \, dr,$$

а общее решение может быть представлено в виде

$$\delta\rho = \xi + \frac{1}{a\pi(R_2^2 - R_1^2)} \int_{R_1}^{R_2} h(r)r \, dr,$$

где параметр ξ удовлетворяет следующему уравнению и граничным условиям:

$$b\Delta\xi - a\xi = h(r), \quad \left. \frac{d\xi}{dr} \right|_{r=R_1} = \left. \frac{d\xi}{dr} \right|_{r=R_2} = 0.$$

Общее решение для параметра ξ имеет вид

$$\xi(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n \phi_n(r), \quad (3)$$

где

$$\phi_n(r) = Y_1(\mu_n)J_0\left(\frac{\mu_n r}{R_2}\right) - J_1(\mu_n)Y_0\left(\frac{\mu_n r}{R_2}\right),$$

$J_k(x)$ и $Y_k(x)$ – соответственно функции Бесселя первого и второго рода индексов $k = 0, 1$, параметры μ_n являются решениями уравнения

$$J_1\left(\frac{\mu_n R_1}{R_2}\right)Y_1(\mu_n) = J_1(\mu_n)Y_1\left(\frac{\mu_n R_1}{R_2}\right).$$

Коэффициенты разложения (3) определяются как

$$\xi_n = -\frac{h_n}{a + b(\mu_n/R_2)^2},$$

где

$$h_n = \frac{2\pi^2\mu_n^2}{4R_2^2 - (\pi\mu_n R_1\phi_n(R_1))^2} \int_{R_1}^{R_2} h(r)\phi_n(r)r dr.$$

При $R_1 = 0$ получаем путем перехода к пределу условие $J_1(\mu_n) = 0$ для вычисления параметров μ_n . Выражения для собственных функций разложения и коэффициенты разложения для поля в этом случае переходят в следующие:

$$\phi_n(r) = Y_1(\mu_n)J_0\left(\frac{\mu_n r}{R_2}\right), \quad h_n = \frac{\pi^2\mu_n^2}{2R_2^2} \int_0^{R_2} h(r)\phi_n(r)r dr.$$

Полученными результатами мы воспользуемся для построения решения для системы, состоящей из нескольких коаксиальных цилиндров с тонкими наноразмерными стенками.

3. СИСТЕМА С НАНОРАЗМЕРНЫМИ СТЕНКАМИ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ПРИСТЕНОЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Рассмотрим систему, состоящую из $N + 1$ вложенных друг в друга коаксиальных цилиндров с радиусами $R_k = (k + 1)R$, где $k = 0, 1, \dots, N$. Для решения задачи необходимо знать пристеночный потенциал для каждого из вложенных цилиндров, причем с разных сторон цилиндра этот потенциал может быть различным. Для конкретности будем рассматривать потенциал вида “ступенька”: пристеночный потенциал действует только на расстоянии $D \ll R$ от стенки цилиндра, величина потенциала постоянна и одинакова для каждой из ограничивающих прослойку поверхностей, но разная для разных прослоек. Хотя такой модельный потенциал является достаточно сильным упрощением, для систем с короткодействующими взаимодействиями (которые здесь рассматриваются) такое упрощение представляется вполне приемлемым. Будем предполагать, что в центральной цилиндрической области величина пристеночного потенциала известна и равна U_0 . Величина пристеночного потенциала для слоя, размещенного между k -м и $(k + 1)$ -м цилиндрами, равна U_k и определяется из условия непрерывности профиля распределения плотности.

На основе полученного выше решения для коэффициентов разложения внешнего поля в ряд по функциям

$$\phi_n^{(k)}(r) = Y_1(\mu_n)J_0\left(\frac{\mu_n^{(k)}r}{(k+1)R}\right) - J_1(\mu_n)Y_0\left(\frac{\mu_n^{(k)}r}{(k+1)R}\right)$$

для k -го слоя ($kR \leq r \leq (k + 1)R$) получаем

$$\begin{aligned} h_n^{(k)} &= \frac{2\pi^2(\mu_n^{(k)})^2}{4(k+1)^2R^2 - (\pi\mu_n^{(k)}kR\phi_n^{(k)}(kR))^2} \times \\ &\times \left(\int_{kR}^{kR+D} h(r)\phi_n^{(k)}(r)r dr + \int_{(k+1)R-D}^{(k+1)R} h(r)\phi_n^{(k)}(r)r dr \right) \approx \\ &\approx \frac{2\pi^2(\mu_n^{(k)})^2 DU_k [\phi_n^{(k)}(kR) + \phi_n^{(k)}((k+1)R)]}{4(k+1)^2R^2 - (\pi\mu_n^{(k)}kR\phi_n^{(k)}(kR))^2}. \end{aligned}$$

Собственные числа $\mu_n^{(k)}$ при $k > 0$ определяются из соотношения

$$J_1\left(\frac{\mu_n^{(k)} k}{k+1}\right) Y_1(\mu_n^{(k)}) = J_1(\mu_n^{(k)}) Y_1\left(\frac{\mu_n^{(k)} k}{k+1}\right).$$

При $k = 0$, т.е. для центрального цилиндра, имеем

$$h_n^{(0)} = \frac{\pi^2 (\mu_n^{(0)})^2 U_0}{2R^2} \int_{R-D}^R h(r) \phi_n^{(0)}(r) r dr \approx \frac{\pi^2 (\mu_n^{(0)})^2 U_0 \phi_n^{(0)}(R) D}{2R^2},$$

где

$$\phi_n^{(0)}(r) = Y_1(\mu_n) J_0\left(\frac{\mu_n^{(0)} r}{R}\right),$$

а $\mu_n^{(0)}$ удовлетворяет условию $J_0(\mu_n^{(0)}) = 0$.

Для слоя с номером $k > 0$ общее решение для распределения плотности дается выражением

$$\begin{aligned} \delta\rho(r) = & \frac{2U_k D}{a\pi(2k+1)R^2} - \\ & - \pi^2 D U_k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^{(k)})^2 [\phi_n^{(k)}(kR) + \phi_n^{(k)}((k+1)R)] \phi_n^{(k)}(r)}{[4(k+1)^2 - (\pi\mu_n^{(k)} k \phi_n^{(k)}(kR))^2] [aR^2 + b(\mu_n^{(k)})^2]}, \end{aligned}$$

где $kR \leq r \leq (k+1)R$. Для случая $k = 0$ (центральный цилиндр) решение имеет вид

$$\delta\rho(r) = \frac{U_0 D}{a\pi R^2} - \frac{\pi^2 D U_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^{(0)})^2 \phi_n^{(0)}(R) \phi_n^{(0)}(r)}{aR^2 + b(\mu_n^{(0)})^2},$$

где $0 \leq r \leq R$. Если ввести обозначения

$$\psi_k(r) = \frac{2}{a\pi(2k+1)} - 2\pi^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^{(k)})^2 [\phi_n^{(k)}(kR) + \phi_n^{(k)}((k+1)R)] \phi_n^{(k)}(r)}{[4(k+1)^2 - (\pi\mu_n^{(k)} k \phi_n^{(k)}(kR))^2] [a + b(\mu_n^{(k)}/R)^2]} \quad (4)$$

при $k > 0$ и

$$\psi_0(r) = \frac{1}{a\pi} - \frac{\pi^2}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^{(0)})^2 \phi_n^{(0)}(R) \phi_n^{(0)}(r)}{a + b(\mu_n^{(0)}/R)^2} \quad (5)$$

для $k = 0$, то мы можем записать для потенциала n -го слоя ($1 \leq n \leq N$) следующее выражение:

$$U_n = U_0 \prod_{k=1}^n \frac{\psi_{k-1}((k+1)R)}{\psi_k((k+1)R)},$$

где функции $\psi_k(r)$ определяются соотношениями (4) и (5). Данное выражение позволяет на феноменологическом уровне описать эффективный пристеночный потенциал рассматриваемой системы, что особенно важно при прогнозировании свойств пространственно ограниченных жидкостей означенной геометрии. Содержащиеся в этом выражении неизвестные параметры (такие, например, как значение U_0) могут быть оценены на основе экспериментальных данных.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученное общее решение для распределения плотности в пространственно ограниченной жидкой системе с геометрией межцилиндрической прослойки представляет определенный практический интерес как отдельная задача, поскольку открывает перспективы эффективной обработки и анализа экспериментальных данных по рассеянию нейтронов и критической опалесценции света в системах с такой геометрией. Что касается оценок эффективного пристеночного потенциала, то они, хотя и являются достаточно упрощенными, могут представлять интерес для экспериментаторов. Дело в том, что значительное количество расчетов в теории жидкостей базируется на использовании явных выражений для потенциалов прямого взаимодействия (частиц в жидкости или частиц с ограничивающими поверхностями). Поскольку точное выражение для потенциалов установить невозможно в принципе, обычно используются модельные потенциалы (см., например, книги [2], [8]). При этом важно иметь возможность определять параметры, входящие в соответствующие выражения для модельных потенциалов, и соотносить их с экспериментальными данными. Смеем надеяться, что представленные выше результаты позволяют сделать шаг в данном направлении.

Список литературы

- [1] Л. А. Булавин, *Нейтронные исследования динамики жидкостей*, Вища школа, К., 1977.
- [2] В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин, *Основы физики воды*, Наукова думка, К., 1991.
- [3] И. М. Франк, *УФН*, **161**:11 (1991), 109–127.
- [4] I. Brovchenko, A. Geiger, A. Oleinikova, D. Paschek, *Eur. Phys. J. E*, **12**:1 (2003), 69–76.
- [5] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *ЖФХ*, **70**:3 (1996), 559–561; **70**:8, 1525–1526; **70**:11, 2102–2103.
- [6] L. A. Bulavin, D. A. Gavryushenko, V. M. Sysoev, *Ukr. J. Phys.*, **52**:10 (2007), 934–938.
- [7] А. Н. Васильев, *ТМФ*, **151**:1 (2007), 149–154.
- [8] К. Крокстон, *Физика жидкого состояния*, Мир, М., 1978.

Поступила в редакцию 2.09.2009
после доработки 6.10.2009