
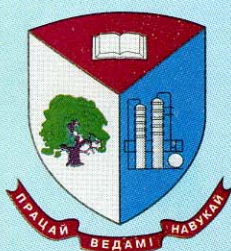


17–18  
мая  
2012 г.



# МАТЕРИАЛЫ

Международной научно-технической конференции  
**АВТОМАТИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ И АВТОМАТИЗАЦИЯ  
ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ**



Минск 2012



## КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЫ ПОЛИВИНИЛ ПИРОЛЛИДОНА

Рассматриваемая система представляет собой молекулу поливинил пиrolлидона (ПВП), два мономерных звена которой схематично представлены на рисунке 1.

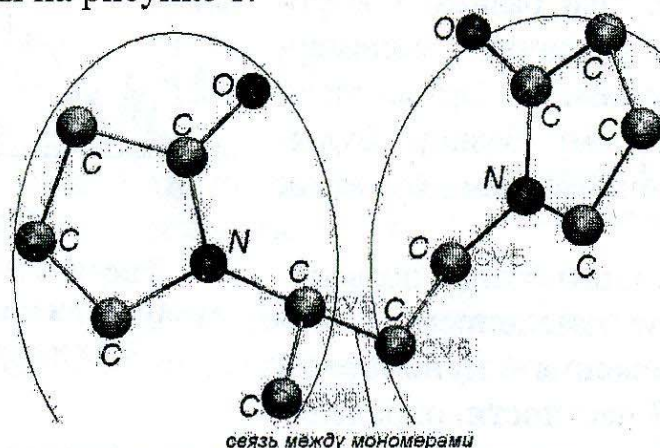


Рисунок 1 – Два мономерных звена полимера ПВП

Для изучения статических корреляций в рассматриваемой макромолекуле на основе данных о положении каждого ее атома может быть предложена процедура конструирования ортонормированного базиса в каждом мономерном звене. Для чего был определен ряд векторов, через координаты которых в дальнейшем были выражены все интересующие нас величины. Такими векторами являлись вектора, соединяющие атомы углерода  $C_{V5}C_{V6}$  и атомы углерода и азота  $C_{V5}N$  (рисунок 2). На этих векторах был построен ортонормированный базис орта  $k$  которого задавалась направлением связи между атомами углерода  $C_{V5}$  и  $C_{V6}$  в мономере. Орта  $j$  отвечала связи углерод – азот, повернутой на угол  $\pi/2 - \alpha$  для соблюдения условия ортогональности,

$$j = \frac{l - k \cos \alpha}{\sin \alpha} = \frac{l - k(l \cdot k)}{\sqrt{1 - (l \cdot k)^2}}, \quad (1)$$

где знак « $\cdot$ » обозначает операцию скалярного произведения векторов.

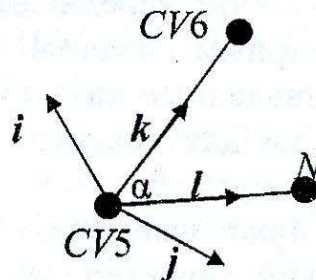


Рисунок 2 – Схема построения ортонормированного базиса



Для взаимной ортогональности векторов  $i$ ,  $k$  и  $j$  определим первый из них следующим образом

$$i = j \times k, \quad (2)$$

где знак « $\times$ » обозначает операцию векторного произведения.

По определению операции векторного произведения полученный таким образом базис будет ортонормированным.

Рассмотрим два базиса, построенных для двух различных мономерных звеньев полимера. Орты, относящиеся ко второму базису, будем обозначать штрихованными буквами:  $(i', j', k')$ .

Введение такого базиса позволило проследить за изменением относительного положения мономерных звеньев цепи. В частности, определяя угол  $\theta$  как угол между ортой  $k$  первого мономерного звена и ортой  $k'$  другого мономера и находя его косинус как

$$\cos \theta = k \cdot k', \quad (3)$$

в результате усреднения по 200 мономерным звеньям получаем представленные на рисунке 3 результаты для среднего значения косинуса угла  $\theta$ .

Ярко выраженный периодический характер данной зависимости обусловлен спиральной структурой исследуемого полимера. Период зависимости приблизительно равен 50 мономерным звеньям.

В свою очередь, представленное на рисунке 4 аналогичное рассмотрение угла  $\varphi$ , определяемого как

$$\cos \varphi = \frac{(j' \times k') \cdot (k \times k')}{\sin \theta}, \quad (4)$$

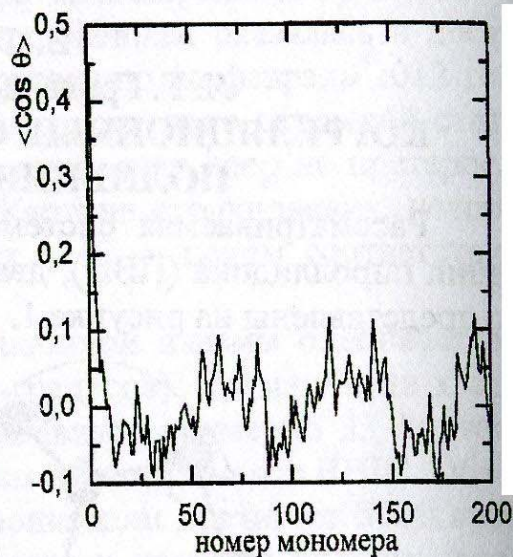


Рисунок 3 – Зависимость среднего значения косинуса угла  $\theta$  от номера мономера

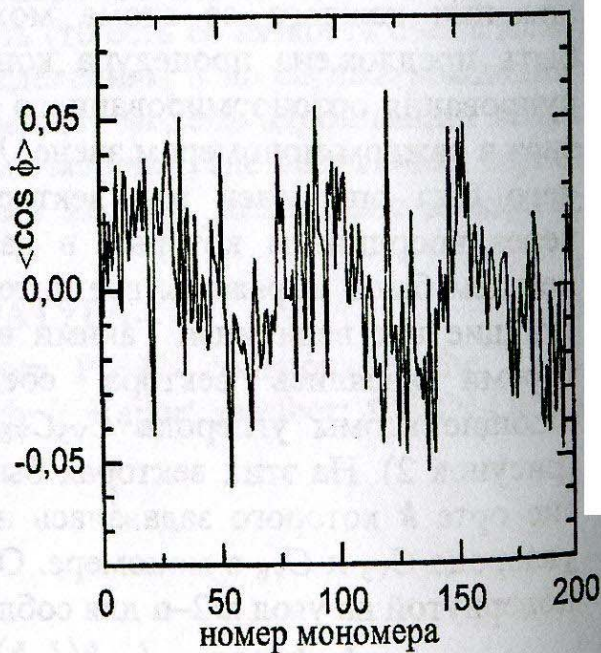


Рисунок 4 – Зависимость среднего значения косинуса угла  $\varphi$  от номера мономера



и задающего фактически относительный поворот плоскостей мономерных звеньев, содержащих атомы углерода и азота, показал, что данный угол меняется случайным образом, что свидетельствует о высокой относительной подвижности мономерных звеньев, практически свободно вращающихся вокруг связей, соединяющих отдельные мономеры ПВП.

Данный вывод также подтверждается непосредственным анализом результатов моделирования. Так, например, на рисунке 5 представлены 8 мономерных звеньев исследуемого полимера.

Анализ их взаимного расположения не позволяет говорить о сколь угодно заметных корреляциях между ними.

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, ассист., канд. физ.-мат. наук;

В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

### **ЭВОЛЮЦИЯ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ С РАЗЛИЧНОЙ ГЛУБИНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЯМ НЕСУЩЕЙ ПОДСИСТЕМЫ**

Хорошо известно, что при переходе от макроструктур к микроструктурам, размер которых определяется нанометровым масштабом, свойства вещества иногда изменяются коренным образом. Так, например, при размерах зерен  $\sim 100$  нм происходит резкое уменьшение или увеличение электросопротивления [1].

Отмечается сильная зависимость диффузионных характеристик от величины зерна в наноструктуре [1]. В целом оказывается, что переход в наноструктурированное состояние определяет коренную перестройку материала не только в масштабном отношении, но и, прежде всего, в свойствах элементов, его образующих, характере их взаимодействия и т. д.

При этом свойства наноструктур определяются не только размером кластеров, но и способами их организации и самоорганизации в нанокластерную структуру. Поэтому представляет интерес выяснение условий, при которых возможно формирование наноструктурного состояния. Согласно положениям термодинамики, любая система стре-

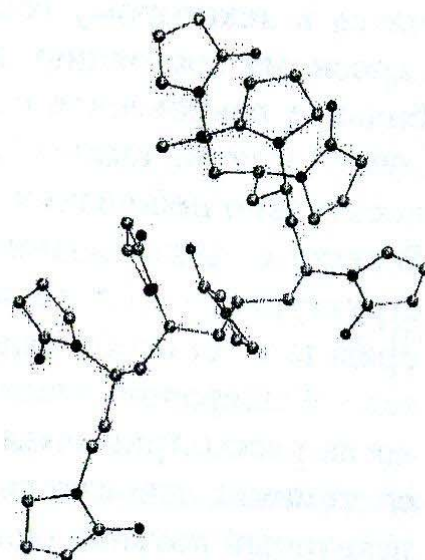


Рисунок 5 – Восемь мономерных звеньев полимера ПВП