Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 1 — 1972

УДК 532.782+678:532.77

А. Ю. ГРОСБЕРГ

О РАСПРЕДЕЛЕНИИ ДАВЛЕНИЯ ПО ПОВЕРХНОСТИ НЕСФЕРИЧЕСКОЙ ГЛОБУЛЫ

Дается анализ распределения давления и плотности глобул различной формы.

Известно, что в достаточно сильном сжимающем внешнем поле $\varphi(r)$ полимерная цепь «схлопывается» в плотную глобулу. При этом, как показано в [1], свободная энергия F и плотность n глобулы определяются через наименьшее собственное значение λ и соответствующую ему собственную функцию ψ уравнения

$$\Delta\psi + \frac{\lambda - U}{a^2}\psi = 0 \tag{1}$$

следующим образом:

$$F = F_0 + N\lambda T, \tag{2}$$

$$n \sim \psi^2 \exp U, \tag{3}$$

где $U = \frac{\varphi}{T}$, a — длина звена, а F_0 — свободная энергия несвязанного клубка.

Если полимерная цепь зажата между какими-нибудь стенками (в качестве таковых могут выступать, например, поверхности соседних глобул), то их действие можно описать введением внешнего поля

$$U = \begin{cases} 0 & \text{внутри } D \\ U_0 & \text{вне } D, \end{cases}$$

где D — некоторая область объема V, ограниченная замкнутой поверхностью Σ; Σ задается уравнением $f(r) = 0$.

Естественно поставить вопрос о распределении давления (и плотности) глобулы по поверхности Σ.

Если свободную энергию (2) и объем V рассматривать как функционалы от функции f, то давление будет равно отношению вариационных производных этих функционалов (с обратным знаком):

$$p = -NT\frac{\frac{\delta\lambda}{\delta f}}{\frac{\delta V}{\delta f}}.$$

Если D есть шар радиуса R, то давление не зависит, конечно, от точки поверхности и легко вычисляется:

$$p = \frac{2NT}{3V} \cdot \left(\frac{\pi a}{R} \right)^2.$$

Предполагая U_0 большим, в регулярной точке поверхности получим (см. приложение)

$$\frac{\delta\lambda}{\delta V} = -a^2 \left| \frac{\partial\psi_0}{\partial n} \right|^2. \tag{4}$$

Здесь n — длина вдоль нормали в рассматриваемой точке, а ψ_0 — нормированная на единицу собственная функция (принадлежащая наименьшему собственному значению) первой внутренней краевой задачи

$$\Delta\psi_0 + \frac{\lambda_0}{a^2}\psi_0 = 0 \text{ (внутри } D) \tag{5}$$

и

$$\psi_0|_\Sigma = 0.$$

Без конкретизации вида области в этом уравнении уже нельзя выделить каких-либо малых параметров. Поэтому дальнейшее исследование можно проводить лишь для областей специального вида. Чтобы сделать качественные выводы о зависимости давления от геометрии поверхности Σ в регулярных и особых точках, мы приведем точные решения для некоторых характерных областей. Таким путем будет выяснена роль анизотропии области и наличия «перетяжки» в ней. Роль особых точек можно выяснить в общем виде.

В качестве простейшей анизотропной области рассмотрим сфероид с расстоянием между фокусами $2\alpha \ll 2R$, где $2R$ — длина оси вращения.

Введем вытянутые и сплюснутые сфероидальные координаты ξ, η, φ (см. [3]) (ξ-поверхности есть сфероиды, а η-поверхности — гиперболоиды). В этих координатах задача (5) в отличие от (1) допускает разделение переменных: $\psi_0 = T(\xi)S(\eta)\Phi(\varphi)$. Расчет показывает, что давление в этом случае равно

$$p = \frac{2NT}{3V}\left(\frac{\pi a}{R}\right)^2 \left\{1 \pm \frac{\alpha^2}{R^2}\left[\frac{\pi^2+3}{9} - \eta^2\,\frac{\pi^2-3}{9}\right]\right\}. \tag{6}$$

(Знак плюс для вытянутого сфероида, а минус — для сплюснутого.)

Отсюда видно, что давление в точке не определяется кривизной поверхности в этой точке. (В противном случае в точке касания второго порядка двух разных сфероидов давления были бы одинаковы, а формула (6) показывает, что это не так.)

Из (6) видно, что давление спадает в удаленных концах области. Эта тенденция усугубляется при дальнейшем вытягивании сфероидов — убывание становится экспоненциальным. Качественно то же самое получается и для цилиндрической или прямоугольной формы области D.

Такое распределение давления является естественным проявлением наличия линейной памяти вдоль цепи. В терминах квантовомеханической аналогии оно означает, что частица, находящаяся в основном состоянии в поле $U(r)$, относительно редко бывает в этих частях области.

Для того чтобы рассмотреть область с «перетяжкой», возьмем в качестве $S(\eta)$ вторую собственную функцию (5) для сплюснутого сфероида ($\alpha \ll R$). Она имеет узел вдоль гиперболоида с диаметром «горловины» $\sim\alpha$ и углом раствора асимптотического конуса $\sim 108°$. Поэтому можно найти функцию ψ_0 для случая, когда Σ состоит из этого однополостного гиперболоида и двух сфероидальных «крышек».

В результате вычислений получим

$$T(\xi) = I_{5/2}\left(\frac{\gamma\alpha\xi}{R}\right)\sqrt{\frac{R}{\alpha\xi}}\left(1 - \frac{11}{42\xi^2}\right) +$$

$$+ \frac{5}{21} I'_{5/2}\left(\frac{\gamma\alpha\xi}{R}\right)\sqrt{\frac{R}{\alpha\xi}}\left(1 - \frac{\alpha^2\xi^2}{R^2}\right)\frac{\gamma\alpha}{R\xi},$$

где γ — первый корень функции Бесселя $I_{5/2}$, а штрихом обозначено дифференцирование функции по своему аргументу, и

$$S(\eta) = B\left\{P_2(\eta) + \frac{\gamma^2\alpha^2}{R^2}\left[\frac{6}{245}P_4(\eta) - \frac{1}{45}\right]\right\},$$

где $P_j(\eta)$ — соответствующий полином Лежандра, а B — нормирующая постоянная.

Зависимость давления от точки на гиперболоиде определяется множителем $\frac{1}{H_\eta^2}T^2(\xi)$, а на сфероиде — множителем $\frac{1}{H_\xi^2}S^2(\eta)$, где H_ξ и H_η — соответствующие коэффициенты Ламе.

Графики этих функций показаны на рисунках.

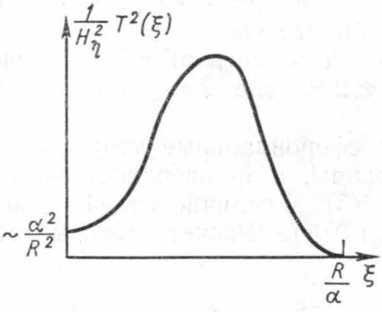

Рис. 1

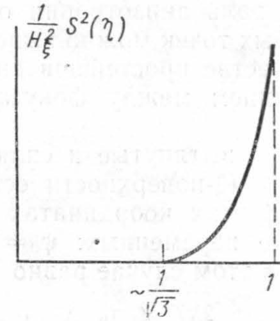

Рис. 2

Если «горловина» гиперболоида расширяется, то минимум давления в ней становится менее ярко выраженным и исчезает вовсе, сливаясь с обоими максимумами, когда область превращается в цилиндр. Следовательно, сильно сжатая по экватору глобула «разваливается» на две глобулы, связанные лишь несколькими нитями.

Рассмотрим поведение давления вблизи угловой точки поверхности Σ.

Так как на поверхности Σ $\psi_0|_\Sigma = 0$, то в угловой точке равны нулю производные от ψ-функции по трем (касательным к поверхности) направлениям, т. е. равен нулю $grad\,\psi_0$. Так получается даже в «слабом изломе» плоской стенки (двугранный угол $\pi - \beta$ или вершина конуса с раствором $\pi - \beta$ при $\beta \ll \pi$), однако обращение в нуль происходит по закону $\left(\frac{\rho}{L}\right)^{\beta/\pi}$, т. е. лишь на длине $\sim L\exp\left\{-\frac{\pi}{\beta}\right\}$, где L — характерный размер области, а ρ — расстояние от угловой точки.

Чтобы перейти от поведения вблизи угла нормальной производной к поведению давления, вернемся к интегральному уравнению

$$\int g(|y|)\,\psi(x+y)\,d^3y = \exp\{U(x)-\lambda\}\,\psi(x), \tag{7}$$

из которого в [1] получено дифференциальное уравнение (1).

Как можем видеть, переход от (7) к (1) возможен лишь, если $a \ll R$, где R — характерная длина изменения функции ψ. В частности, в формуле (4) должно быть $\delta V \gg a^3$. Поэтому на полученном из (5) профиле давления имеют смысл лишь такие детали, протяженность которых заметно превосходит a. Кроме того, структура теории возмущений для (1) и (7) одинакова, так что по аналогии с (10) получим

$$\delta\lambda = -|\psi(M)|^2\,\delta V, \tag{8}$$

где $\psi(M)$ — внутреннее граничное значение собственной функции уравнения (7). Однако в пограничном слое (толщиной $\sim a$) собственная функция (5) сильно отличается от собственной функции (7). Для получения $\psi|_\Sigma$ с точностью до $\left(\frac{a}{R}\right)^3$ следует уточнить краевые условия для (1). Для этого положим в (7) $x \in \Sigma$ и для $\psi(x+y)$ воспользуемся формулой Тэйлора с центром в точке x. В отличие от случая внутренних точек здесь уже первый член разложения дает ненулевой вклад, и в регулярной точке поверхности получается краевое условие третьего рода

$$\left\{\psi - \nu a\frac{\partial\psi}{\partial n}\right\}\Big|_\Sigma = 0,$$

где ν — численный множитель порядка 1, зависящий от конкретного вида ядра g.

Аналогичная процедура вблизи угловой точки дает

$$\psi - a\sum_i \nu_i \frac{\partial\psi}{\partial n_i} = 0, \tag{9}$$

где i — номер грани угла, а ν_i — здесь функции точки поверхности, причем ν_i обращается в нуль на расстоянии $\sim a$ от i-той грани.

В результате в двугранном угле давление окажется $\sim \left(\frac{a}{R}\right)^4$, что лишний раз подтверждает, что (4) правильно описывает ход давления на расстояниях $\gtrsim a$ от угловой точки. При большем числе граней (9) дает $p \sim \left(\frac{a}{R}\right)^6$, поэтому вблизи такого угла нужно пользоваться дифференциальным уравнением четвертого порядка, так что в действительности в таком угле $p \leqslant \left(\frac{a}{R}\right)^5$.

Все это, разумеется, не касается «слабого излома» с достаточно малым β: при $\beta \leqslant \dfrac{\pi}{\ln\frac{L}{a}}$ излом вообще не сказывается на поведении давления.

Приложение (вывод формулы (4))

Допустим, что за счет деформации поверхности Σ вблизи точки M объем увеличился на δV. При этом собственное значение изменилось на $\delta\lambda = \int \psi^* \hat{h} \psi\, dV$, где оператор возмущения $\hat{h}$ равен

$$h = \begin{cases} -U_0 & \text{внутри } \delta V \\ 0 & \text{вне } \quad \delta V \end{cases},$$

поэтому

$$\delta\lambda = -U_0 \, |\, \psi(M) \,|^2 \, \delta V. \tag{10}$$

Отсюда (или из (8)) следует, что в каждой точке на поверхности глобулы давление и плотность (3) пропорциональны.

Не ограничивая общности, можно считать, что поверхность Σ вблизи точки M задается уравнением $z = f(x, y)$. Следуя [2], обозначим

$$p_1 = x, \; p_2 = y, \; p_3 = \frac{z - f(x, y)}{\sqrt{\varepsilon}},$$

где $\varepsilon = \frac{1}{U_0}$. Можно показать [2], что в пограничном слое производные волновой функции по разным p одного порядка по ε. Поэтому, сохраняя члены только нулевого порядка по ε и учитывая, что $[1 + (f_x')^2 + (f_y')^2] \frac{\partial}{\partial p_3} = \sqrt{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial n}$, получим во внешней области

$$\varepsilon a^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial n^2} - \psi = 0,$$

т. е.

$$\psi = A \exp\left\{ \frac{n_0 - n}{a \sqrt{\varepsilon}} \right\}. \tag{11}$$

Именно в пограничном слое, где справедливо это выражение для собственной функции уравнения (1), последняя сильно отличается от точной собственной функции (7). Это, однако, несущественно, так как мы используем ψ лишь как вспомогательное орудие для отыскания λ.

Волновую функцию внутри области будем искать в виде ряда по степеням $\sqrt{\varepsilon}$ $\psi = \psi_0 + \sqrt{\varepsilon}\psi_1 + \dots$.

Граничное условие состоит в равенстве внешней и внутренней логарифмической производной по нормали. Так как $\psi_0|_\Sigma = 0$, то согласно (11), получим

$$\frac{\frac{\partial \psi_0}{\partial n}}{\sqrt{\varepsilon} \; \psi_1} = -\frac{1}{a \sqrt{\varepsilon}},$$

что и дает (4).

Примененный метод аналогичен известному из электродинамики методу, основанному на краевом условии М. А. Леонтовича.

Выражаю глубокую благодарность акад. И. М. Лифшицу за постановку задачи и систематические обсуждения в процессе ее решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 55, 2408, 1968.
2. Вишик М. И., Люстерник Л. А. «Успехи математических наук», 12, 3—122, 1957.
3. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. М., ИЛ, 1958.

Поступила в редакцию
30.11 1970 г.

Кафедра
квантовой теории