
РОЗПОДІЛ РІДИНИ В ОБМЕЖЕНІЙ СИСТЕМІ ПІД ДІЄЮ НЕОДНОРІДНОГО ПОТЕНЦІАЛУ

О.М. ВАСИЛЬЄВ,^{1,2} П.І. ГОРДІЙЧУК¹

¹Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Просп. Акад. Глушкова 2, корп. 1, Київ 03022; e-mail: vasiliev@univ.kiev.ua)

²Національний технічний університет України "КПІ", медико-інженерний факультет,
кафедра біомедичної інженерії
(Вул. Янгеля 16/2, Київ 03056)

УДК 532
©2010

В статті розраховано профіль розподілу густини просторово обмеженої рідкої системи з геометрією циліндра за умови дії пристінкового потенціалу, неоднорідного вздовж напрямку циліндра. Задачу розв'язано в загальному випадку, коли система знаходиться під дією зовнішнього поля з радіальною симетрією, після чого аналізується частинний випадок пристінкового потенціалу спеціального типу та проводяться числові розрахунки.

1. Вступ

Суттєвий прорив в дослідженнях рідких систем, в тому числі і просторово обмежених, пов'язаний з бурхливим розвитком комп'ютерних технологій в останні десятиліття (див., наприклад, [1–4]). Причина проста і цілком зрозуміла: арсенал теоретичних методів дослідження рідких систем хоча і збагачений цілою низкою досить продуктивних підходів та методик, тим не менш його навряд чи можна вважати достатнім. Тому значна кількість важливих з прикладної точки зору задач розв'язується з використанням комп'ютерних розрахунків.

Серед найбільш потужних комп'ютерних методів, що з успіхом застосовуються при вирішенні задач по моделюванню та прогнозуванню властивостей рідких просторово обмежених систем можна виділити два фундаментальних напрямки чи підходи. Це безпосередньо комп'ютерне моделювання та теорія функціоналу густини вільної енергії [5–11]. В рамках першого підходу виконується імітаційне моделювання поведінки систем, що складається з багатьох частинок.

Характерною ознакою даного підходу є те, що рідина розглядається як сукупність великої кількості індивідуальних частинок, а розрахунок статистичних характеристик виконується шляхом усереднення методами Монте-Карло (МК) або молекулярної динаміки. В цьому напрямку досягнуто значних успіхів, причому більшість розрахунків дозволяє враховувати мікроструктуру рідкої речовини в порах малих розмірів, тобто проводити дослідження на рівні атомарних функцій розподілу ([12]). Слід зазначити, що незважаючи на певну специфіку результатів, отримуваних методами МК, вони є надзвичайно важливими, оскільки мають пряме застосування в промисловості, дозволяють перевіряти передбачувані теоретично ефекти та перевіряти їх. Інша важлива область застосування досліджень рідин методами МК в малих порах є прогнозування та вивчення різноманітних біофізичних об'єктів та систем. В даному випадку отримують не тільки нові цікаві результати, але іноді й заповнюють певні прогалини, пов'язані з неможливістю проведення прямих експериментальних вимірів.

Інший важливий напрямок досліджень, що отримав потужний розвиток протягом декількох останніх десятиліть, носить назву теорії функціоналу густини вільної енергії (ТФГ) і має декілька модифікацій, в залежності від об'єкта дослідження та рівня застосування при цьому комп'ютерних методик. Цей метод гарно зарекомендував себе при вивченні різних систем та феноменів, починаючи від квантових багатоелектронних систем і закінчуючи процесами сорбції і фазової поведінки суттєво неоднорідних рідин (див., наприклад, [13–33]). Що стосується застосува-

ння ТФГ до дослідження рідин, і в тому числі просторово обмежених за наявності зовнішнього поля, то базовим є припущення про те, що рідина являє собою суцільне неперервне середовище, яке описується функцією розподілу густини. Відповідно, вільна енергія системи може бути представлена як функціонал від густини вільної енергії системи, яка, в свою чергу, залежить від густини розподілу. Тому серед задач, які з успіхом розв'язуються в рамках підходів ТФГ є задача по розрахунку профілів розподілу рідин в нанопорах. Проте, незважаючи на серйозні успіхи, ряд принципових питань та проблем залишаються нерозкритими чи недослідженими належним чином. Зокрема, числове моделювання, в тому числі і на основі ТФГ, дає досить непогані результати для просторово обмежених систем мікророзмірів, коли розміри системи лише в декілька разів перевищують розміри частинок речовини. При збільшенні цього співвідношення, тобто коли маємо справу з мезорозмірними системами, проводити числовий аналіз значно важче, оскільки як мінімум кількість частинок у виборці, по якій проводиться статистичне усереднення, має суттєво зрости. Більше того, в таких випадках, в першу чергу, викликає інтерес згладжена функція розподілу густини, в якій нівелюються ефекти, пов'язані зі скінченністю розмірів частинок. Такі функції можна відновити на основі експериментальних даних. Наприклад, важлива інформація щодо статистичних та термодинамічних характеристик рідких просторово обмежених систем може бути отримана на основі експериментів по рефракції нейтронів [34–42]. Зокрема, відомо, що на розподіл густини рідини в циліндричній порі суттєво впливає пристінковий потенціал [43–45], а сам характер розподілу залежить від значення температури в системі. Особливо цікавою є поведінка системи в околі критичного стану. Задача ця, незважаючи на її складність, радше теоретична в тому сенсі, що застосування методів МК чи молекулярної динаміки для її розв'язання дозволило би отримати частинні результати, в той час коли бажано мати загальне уявлення про поведінку системи.

Слід зазначити, що в низці теоретичних робіт виключно аналітичними методами розв'язано подібну задачу по розрахунку профілю густини в системі циліндричної геометрії під дією зовнішнього поля, зокрема, пристінкового потенціалу (див., наприклад, [46–51]). При цьому вважалось, що пристінковий потенціал є однорідним вздовж напрямку циліндра. На практиці це, зрозуміло, не завжди так. Тому в даній статті розраховано профіль густини розподілу рідини в рамках припущення про неоднорідність пристінко-

вого потенціалу. Нами використовується підхід, запропонований раніше в роботах [46–50] та розвинений згодом в [51]. Спочатку задача розв'язується для зовнішнього поля загального вигляду, з радіальною симетрією та залежного від координати вздовж напрямку циліндра. Після цього окремо аналізується випадок, коли пристінковий потенціал є суперпозицією базового однорідного вздовж осі циліндра потенціалу та неоднорідної добавки. Відзначимо, що застосована в роботі методологія хоча і є досить простою, дозволяє отримувати достовірні результати, перевірені для ряду систем, зокрема, на основі експериментів по розсіянню нейтронів. Результати, отримані раніше цим же методом для однорідних вздовж осі пори систем добре узгоджуються з даними щодо моделювання таких систем методами МК – якщо зробити поправку на те, що тут всі частинки вважаються точковими, тому розрахована функція розподілу є аналогом згладженої функції розподілу густини частинок скінчених розмірів. Все це дає підстави вважати, що надійними є і оригінальні результати, отримані для критичної поведінки рідини в порі, що знаходиться під дією неоднорідного пристінкового потенціалу.

2. Досліджувана система

Розглянемо циліндричну пору радіусом R , заповнену однокомпонентною рідиною. Рідина знаходиться під дією зовнішнього поля $h(r, z)$, де через r позначено відстань від осі циліндра (тобто $0 \leq r \leq R$), а через z позначено координату вздовж осі циліндра. Не обмежуючи загальності, можемо вважати, що вздовж осі циліндра поле є періодичним з періодом L , що означає $h(r, z + L) = h(r, z)$, $0 \leq z \leq L$.

Внаслідок дії зовнішнього поля $h(r, z)$ розподіл густини в порі стає неоднорідним. Представимо залежність густини рідини $\rho(r, z)$ в порі від просторових координат у вигляді $\rho(r, z) = \rho_0 + \delta\rho(r, z)$, де через ρ_0 позначено густину рідини за відсутності поля, а $\delta\rho(r, z)$ є відхиленням густини від однорідного розподілу ρ_0 . Густина ρ_0 відповідає мінімуму функціоналу вільної енергії за відсутності поля, і зокрема, пристінкового потенціалу. Тут також слід врахувати, що в рамках застосованого підходу частинки рідини вважаються точковими, тобто рідина розглядається як суцільне середовище. За таких припущень, очевидно, функція рівноважного розподілу рідини в порі має бути сталою, а розподіл однорідним.

Добавка до вільної енергії (та, що припадає на комірку циліндра довжиною L), зумовлена дією поля,

в такому випадку дорівнює

$$\delta\Phi = \frac{1}{2} \int (a(\delta\rho)^2 + b(\nabla\delta\rho)^2 + 2h(r, z)\delta\rho) dV, \quad (1)$$

де a та b є феноменологічними параметрами моделі, а інтегрування тут і далі виконується по об'єму комірки циліндра, визначеної відповідно до періоду потенціалу зовнішнього поля (див. рис. 1). Задача зводиться до пошуку мінімуму функціонала за додаткової умови

$$\int \delta\rho dV = 0, \quad (2)$$

яка означає незмінність загальної маси рідини в системі (див., наприклад, ([46–50])). В результаті отримуємо рівняння

$$a\delta\rho - b\Delta\delta\rho = -(h(r, z) + \lambda), \quad (3)$$

де невідомий множник λ шукається з умови (2). Крім цього, мають виконуватись граничні умови

$$\left. \frac{\partial\delta\rho}{\partial r} \right|_{r=R} = 0, \quad (4)$$

та умови періодичності

$$\delta\rho(r, z + L) = \delta\rho(r, z). \quad (5)$$

Зрозуміло, що розв'язок суттєво залежить від вигляду поля $h(r, z)$. Як відзначалося вище, спочатку знайдемо загальний розв'язок, а потім проаналізуємо частинний випадок.

3. Загальний розв'язок

Для отримання розв'язку представимо відхилення густини як

$$\delta\rho(r, z) = \xi(r, z) - \lambda/a, \quad (6)$$

після чого для параметра $\xi(r, z)$ маємо рівняння

$$a\xi - b\Delta\xi = -h(r, z) \quad (7)$$

з граничними умовами

$$\left. \frac{\partial\xi}{\partial r} \right|_{r=R} = 0 \quad (8)$$

та умовою періодичності

$$\xi(r, z + L) = \xi(r, z). \quad (9)$$

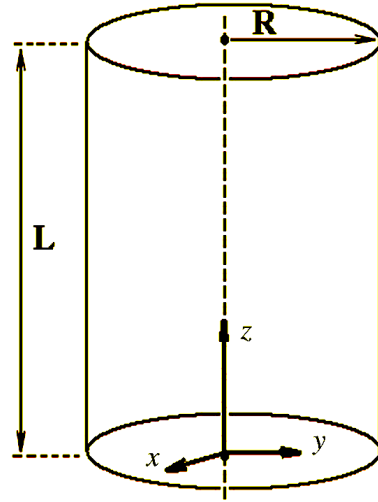


Рис. 1. Геометрія досліджуваної системи: циліндр радіусом R , період поля вздовж осі циліндра становить L

Параметр λ визначається співвідношенням

$$\lambda = \frac{2a}{R^2 L} \int_0^L dz \int_0^R \xi(r, z) r dr. \quad (10)$$

Таким чином, для отримання загального розв'язку необхідно знайти функцію $\xi(r, z)$.

Враховуючи умову періодичності (9), представляємо шукану функцію $\xi(r, z)$ у вигляді ряду

$$\xi(r, z) = \sum_{m=0}^{\infty} \xi_m^{(1)}(r) \cos\left(\frac{2\pi m z}{L}\right) + \xi_m^{(2)}(r) \sin\left(\frac{2\pi m z}{L}\right), \quad (11)$$

де коефіцієнти розкладу $\xi_m^{(1,2)}(r)$ задовольняють рівняння

$$\left(a + \frac{4\pi^2 m^2}{L^2} b\right) \xi_m^{(k)} - b\Delta_r \xi_m^{(k)} = -h_m^{(k)}(r). \quad (12)$$

Тут $k = 1, 2$, $\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r}\right)$, а коефіцієнти розкладу

$$h_m^{(k)}(r) = \frac{2 - \delta_{0m}}{L} \int_0^L h(r, z) \cos\left(\frac{2\pi m z}{L} - \frac{\pi(k-1)}{2}\right) dz, \quad (13)$$

де через δ_{ij} позначено символ Кронекера. Крім того, мають виконуватись граничні умови

$$\left. \frac{\partial \xi_m^{(k)}}{\partial r} \right|_{r=R} = 0. \quad (14)$$

Значення параметра λ визначається на основі коефіцієнта розкладу $\xi_0^{(1)}(r)$, а через нього через поле $h(r, z)$, таким способом:

$$\lambda = -\frac{2}{R^2 L} \int_0^L dz \int_0^R h(r, z) r dr. \quad (15)$$

Розв'язок для коефіцієнтів розкладу $\xi_m^{(1,2)}(r)$ можна шукати у вигляді рядів ($k = 1, 2$):

$$\xi_m^{(k)}(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi_{m,n}^{(k)} J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right), \quad (16)$$

де $J_0(u)$ є функціями Беселя нульового індексу, власні числа μ_n є нулями функції Беселя першого індексу, тобто $J_1(\mu_n) = 0$ (при цьому вважаємо $\mu_0 = 0$). Неважко показати, що коефіцієнти розкладу $\xi_{m,n}^{(k)}$ визначаються співвідношенням

$$\xi_{m,n}^{(k)} = -\frac{h_{m,n}^{(k)}}{b\left(a/b + (2\pi m/L)^2 + (\mu_n/R)^2\right)}, \quad (17)$$

де параметри розкладу поля $h_{m,n}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) знаходяться так:

$$h_{m,n}^{(k)} = \frac{2}{R^2 J_0^2(\mu_n)} \int_0^R h_m^{(k)}(r) J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) r dr. \quad (18)$$

Співвідношення (6), (11), (13), (15)–(18) визначають розв'язок задачі. Зокрема, для густини $\delta\rho(r, z)$ розподілу рідини в порі, враховуючи ту обставину, що $h_{0,0}^{(1)} = -\lambda$, а $\xi_{0,0}^{(1)} = -h_{0,0}^{(1)}/a$, можемо записати

$$\delta\rho(r, z) = \sum_{k=0}^1 \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_{m,n}^{(k+1)} J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) \cos\left(\frac{2\pi m z}{L} - \frac{\pi k}{2}\right), \quad (19)$$

де параметри $\xi_{m,n}^{(k)}$ розраховують відповідно до наведеного вище співвідношення (17).

Проаналізуємо отриманий результат для частинного випадку пристінкового потенціалу спеціального типу.

4. Пристінковий потенціал з характерним масштабом періодичності

У загальному випадку пристінковий потенціал можна представити як суперпозицію просторових гармонік.

Розглянемо ситуацію, коли серед всього такого набору гармонік одна (крім гармоніки, що відповідає однорідному вздовж осі циліндра полю) є домінуючою. Позначимо характерний масштаб неоднорідності, що відповідає цій гармоніці, через L . Для більшої простоти будемо вважати, що потенціал $h(r, z)$ описується такою залежністю:

$$h(r, z) = U(r) \left(1 + \varepsilon \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right)\right), \quad (20)$$

де ε визначає ступінь неоднорідності потенціалу, а функція $U(r) = U_0$ при $R-d \leq r \leq R$ та $U(r) = 0$ при $r < R-d$, що відповідає потенціалу типу “сходінки” товщиною d .

Для такого пристінкового потенціалу частина з наведених раніше співвідношень суттєво спрощується. Зокрема, для параметра λ маємо

$$\lambda = -\frac{U_0 d}{R} \left(2 - \frac{d}{R}\right), \quad (21)$$

розв'язок для параметра $\xi(r, z)$ має структуру

$$\xi(r, z) = \xi_1(r) + \xi_2(r) \cos\left(\frac{2\pi z}{L}\right), \quad (22)$$

причому

$$\xi_1(r) = -\frac{1}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h_n}{a/b + (\mu_n/R)^2} J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right), \quad (23)$$

$$\xi_2(r) = -\frac{\varepsilon}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h_n}{a/b + (2\pi/L)^2 + (\mu_n/R)^2} J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right), \quad (24)$$

і при цьому для $n > 0$

$$h_n = \frac{2U_0}{R^2 J_0^2(\mu_n)} \int_{R-d}^R J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) r dr = \frac{2U_0(1-d/R)J_1\left(\left(1-\frac{d}{R}\right)\mu_n\right)}{\mu_n J_0^2(\mu_n)}. \quad (25)$$

На рис. 2 наведено залежність параметра $\Delta n = b\delta\rho/U_0$ як функції просторових координат для значень $\varepsilon = 0, 1$, $d/R = 0, 05$, $L/R = 10$ та значення співвідношення $a/b = 1$.

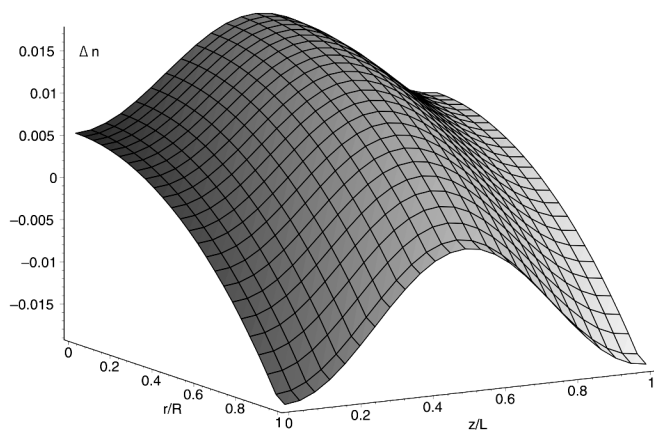


Рис. 2. Значення параметра $\Delta n = b\delta\rho/U_0$ як функція просторових координат

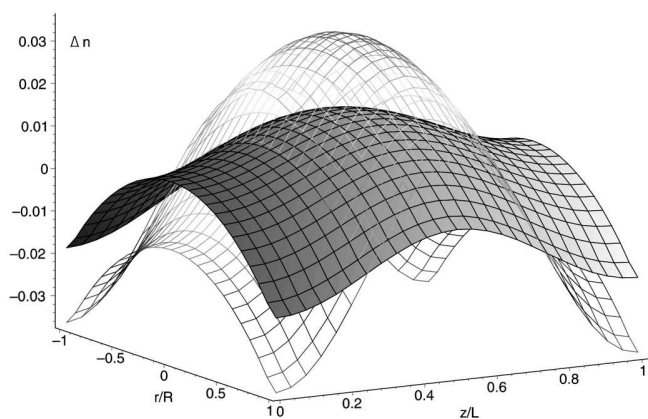


Рис. 3. Значення параметра $\Delta n = b\delta\rho/U_0$ як функція просторових координат для температури $\tau = 1$ (суцільна поверхня) та $\tau = 0, 1$ (прозора поверхня)

Параметр $a/b \equiv \kappa^2$ має розмірність величини, оберненої до квадрата відстані (при цьому радіус кореляції $R_C = |\kappa|^{-1}$ [52]). Загальноприйнятим є припущення про те, що цей параметр залежить від температури, причому згідно з сучасними уявленнями теорії масштабної інваріантності (скейлінгу), така залежність є степеневою (див., наприклад, [52–54]). Зокрема, якщо позначити безрозмірну температуру як $\tau = (T - T_C)/T_C$ (T – температура, а T_C – критичне значення температури), то тоді можемо записати $\kappa^2 = \kappa_0^2 \tau^{2\nu}$, де κ_0 – обернена амплітуда радіуса кореляції, а ν – критичний індекс (для широкого класу рідин $\nu \approx 0, 63$) [52]. Таким чином, при зміні температури радіус кореляції системи R_C змінюється в досить широкі межі. З іншого боку, радіус кореляції є тим характерним масштабом, з яким порівнюються інші

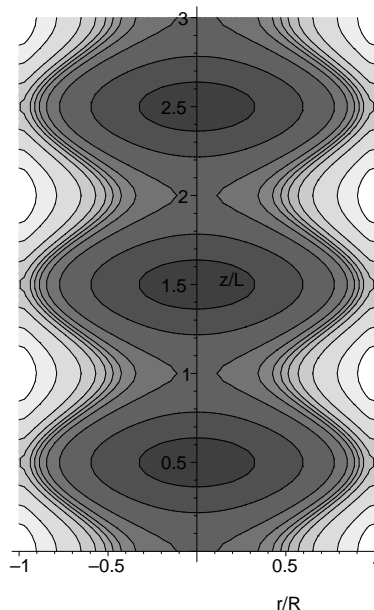


Рис. 4. Контурний графік для залежності профіля густини рідини (параметр $\Delta n = b\delta\rho/U_0$) в порі від просторових координат для значення температури $\tau = 1$. Контурні лінії зображено для значень $\Delta n = 0, \pm 0, 001, \pm 0, 0025, \pm 0, 005, \pm 0, 01, \pm 0, 015, \pm 0, 02$

характерні просторові параметри системи – в даному випадку радіус пори та розмір просторової моди неоднорідності пристінкового потенціалу. Тому не дивно, що зміна температури, внаслідок зміни радіуса кореляції, суттєво впливає на характер розподілу рідини в порі. На рис. 3 для порівняння наведено поверхні розподілу величини Δn для значення безрозмірної температури $\tau = 1$ та $\tau = 0, 1$.

При наближенні системи до критичного стану (коли параметр κ^2 прямує до нуля), вплив пристінкового потенціалу на неоднорідність розподілу густини зростає. Більш детально цю ситуацію можна прослідити по контурних графіках на рис. 4–6. Там наведено ілюстрації для профілів густини розподілу послідовно для значень $\tau = 1$ (див. рис. 4), $\tau = 0, 5$ (див. рис. 5) та $\tau = 0, 1$ (див. рис. 6).

Для зручності на графіках зображено три суміжні комірки системи, що досліджується. В такому вигляді легше уявити характер розподілу рідини у всій системі, з урахуванням її періодичності.

Ефект від зміни температури цілком очікуваний: в близькому до критичного стані рідина стає більш “структурованою”, а екстремуми розподілу більш гострі, порівняно з випадком, коли система перебуває за межами критичного стану ($\tau \sim 1$). В даному випадку ефект від зміни температури оцінений кількісно.

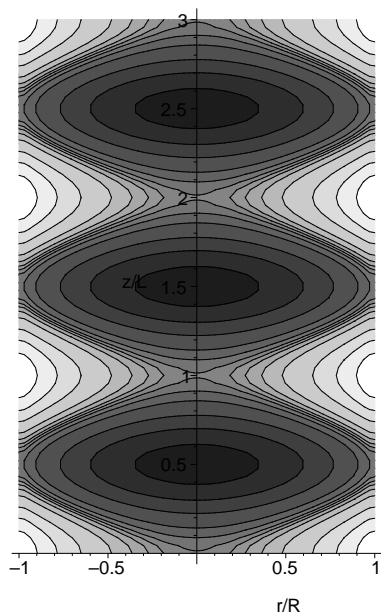


Рис. 5. Контурний графік для залежності профіля густини рідини (параметр $\Delta n = b\delta\rho/U_0$) в порі від просторових координат для значення температури $\tau = 0,5$. Контурні лінії зображено для значень $\Delta n = 0, \pm 0,001, \pm 0,0025, \pm 0,005, \pm 0,01, \pm 0,015, \pm 0,02$

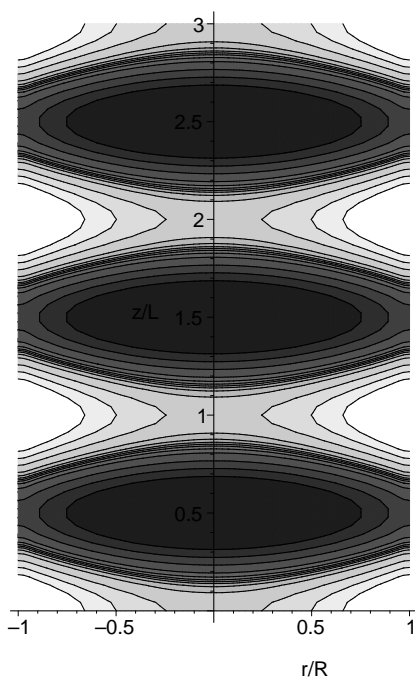


Рис. 6. Контурний графік для залежності профіля густини рідини (параметр $\Delta n = b\delta\rho/U_0$) в порі від просторових координат для значення температури $\tau = 0,1$. Контурні лінії зображено для значень $\Delta n = 0, \pm 0,001, \pm 0,0025, \pm 0,005, \pm 0,01, \pm 0,015, \pm 0,02$

5. Висновки

Критична поведінка рідких систем в малих об'ємах є задачею перспективною і досить складною (див., наприклад, [55–59]). Тому, незважаючи на значний і багаторічний інтерес до неї дослідників, залишається ціла низка не розв'язаних донині питань. До таких задач відноситься в повній мірі проблема заповнення малорозмірних систем флюїдами. Як правило, рідину-заповнювач для цього переводять в критичний або позакритичний стан. З іншого боку, відомо, що в білякритичному стані рідина характеризується аномальною сприйнятливістю. Зокрема, як показано вище, може виникнути проблема, пов'язана з нерівномірністю розподілу (вздовж пори) рідини, спричинена навіть незначною неоднорідністю пристінкового потенціалу. Тому отримані результати можуть бути корисними, крім іншого, для прогнозування властивостей пористих та малорозмірних систем, заповнених рідиною і, зокрема, для визначення граничних значень неоднорідностей пристінкових потенціалів у відповідних порах.

1. N. Wilding, *J. Phys. Condens. Matter.* **9** (1997).
2. K. Binder, *The Monte Carlo Method in Statistical Physics* (Springer, Berlin, 1979).
3. K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction* (Springer, Berlin, 1988).
4. D.P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000).
5. R. Evans, *Advances in Physics* **28**, 143 (1978).
6. R. Evans, in *Fundamentals of Inhomogeneous Fluids*, edited by D. Henderson, (Marcel Dekker, New York, 1992) p. 85.
7. H. Lowen, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 11897 (2002).
8. J. K. Percus, *Accounts of Chemical Research* **27**, 224 (1994).
9. H. T. Davis, *Statistical Mechanics of Phases, Interfaces and Thin Films* (Wiley-VCH, New York, 1996).
10. J.-L. Barrat, J.-P. Hansen, *Basic Concepts for Simple and Complex Liquids* (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).
11. J.-P. Hansen and I. McDonald, *Theory of Simple Liquids* (Elsevier, USA, 2006).
12. Г.Н. Саркісов, *УФН* **172**, 6 (2002).

13. C.M. Lastoskie, K. Gubbins, and N.J. Quirke, *Phys. Chem.* **97**, 4786 (1993).
14. J.P. Olivier, *J. Porous Mat.* **2**, 9 (1995).
15. P. Ravikovitch, D. Wei, W.T. Chueh, G.L. Haller, and A.V. Neimark, *J. Phys. Chem. B* **101**, 3671 (1997).
16. P. Ravikovitch, A. Vishnyakov, and A.V. Neimark, *Phys. Rev. E* **64**, 011602 (2001).
17. M. B. Sweatman and N. Quirke, *Molecular Simulation* **31**, 667 (2005).
18. H. P. Fischer *et al.*, *The Journal of Chemical Physics* **108**, 3028 (1998).
19. D. Reinel and W. Dieterich, *The Journal of Chemical Physics* **104**, 5234 (1996).
20. M. Valera, F.J. Pinski, and D.D. Johnson, *Phys. Rev. E* **64**, 062501 (2001).
21. S. Smithline, in *Chemical Applications of Density-Functional Theory*, edited by B.B. Laird, R.B. Ross, and T. Ziegler (Amer. Chem. Soc., Washington, 1996), p. 311.
22. A.R. Denton and H. Lowen, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 8907 (1997).
23. A.L. Frischknecht, L.J.D. Frink, *Phys. Rev. E* **72**, 041924 (2005).
24. K. Jaqaman, K. Tuncay, and P.J. Ortoleva, *The Journal of Chemical Physics* **120**, 926 (2004).
25. K. Johnston and M. W. Finnis, *Journal of the American Ceramic Society* **85**, 2562 (2002).
26. J. Reinhard, W. Dieterich, P. Maass, and H.L. Frisch, *Phys. Rev. E* **61**, 422 (2000).
27. F. Schmid, *Phys. Rev. E* **55**, 5774 (1997).
28. M.C. Stewart and R. Evans, *Phys. Rev. E* **71**, 011602 (2005).
29. P.S. Christopher and D.W. Oxtoby, *The Journal of Chemical Physics* **121**, 5005 (2004).
30. P.S. Christopher and D.W. Oxtoby, *The Journal of Chemical Physics* **119**, 10330 (2003).
31. D.L. Cheung and F. Schmid, *The Journal of Chemical Physics* **120**, 9185 (2004).
32. F. Schmid, *The Journal of Chemical Physics* **104**, 9191 (1996).
33. S. Nath, A. Frischknecht, J. Curro, and J. McCoy, *Macromolecules* **38**, 8562 (2005).
34. I.M. Frank, *Particles and Nuclei* **2**, 807 (1972).
35. Ф.Л. Шапиро, *Физика нейтронов* (Наука, Москва, 1976).
36. И.М. Франк, *Природа* **9**, 24 (1972).
37. И.М. Франк, *УФН* **161**, 11 (1991).
38. Л.А. Булавин, *Нейтронные исследования динамики жидкостей* (Высшая школа, Киев, 1977).
39. В.И. Сугаков, А.В. Чалый, Л.М. Черненко, *УФЖ* **35**, 7 (1990).
40. В.И. Сугаков, А.В. Чалый, Л.М. Черненко, *УФЖ* **36**, 9 (1991).
41. Л.А. Булавин, Г.Н. Вербінська, І.М. Вишневський, *Квазіупругие розсіяння нейтронів у рідинах* (Київ, АСМІ, 2004).
42. Л.А. Булавин, Т.В. Кармазина, В.В. Клепко, В.І. Слісенко, *Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ* (Академперіодика, Київ, 2005).
43. В.Я. Антонченко, А.С. Давыдов, В.В. Ильин, *Основы физики воды* (Наукова думка, Киев, 1991).
44. I. Brovchenko, A. Geiger, A. Oleinikova, and D. Paschek, *Eur. Phys. J. E.* **12**, 69 (2003).
45. I. Brovchenko and A. Oleinikova, *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, ed. by M. Rieth and W. Schommers, **1**, 1 (2005).
46. Л.А. Булавин, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сысоев, *ЖФХ* **70**, 3 (1996).
47. Л.А. Булавин, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сысоев, *ЖФХ* **70**, 8 (1996).
48. Л.А. Булавин, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сысоев, *ЖФХ* **70**, 11 (1996).
49. L.A. Bulavin, D.A. Gavryushenko, and V.M. Sysoev, *Ukr. Journ. Phys.* **52**, 10 (2007).
50. Л.А. Булавин, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сысоев, *ДАН України* **7**, 85 (1997).
51. А.Н. Васильев, *Теоретическая и математическая физика*, **151**, 1 (2007).
52. М.А. Анисимов, *Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах* (Наука, Москва, 1987).
53. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Наука, Москва, 1982).
54. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений* (Мир, Москва, 1973).
55. J.L. Cardy, *Finite Size Scaling* (Amsterdam, North-Holland, 1988).
56. V. Privman, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems* (World Scientific, Singapore, 1990).
57. K. Binder, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **43**, 33 (1992).
58. В.П. Воронов, В.М. Булейко, *ЖЭТФ* **113**, 3 (1998).

59. J.A. Lipa, M. Coleman, and D.A. Stricker, *J. Low Temp. Phys.* **124**, 443 (2001).

Одержано 22.06.09

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЖИДКОСТИ В ОГРАНИЧЕННОЙ СИСТЕМЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ НЕОДНОРОДНОГО ПОТЕНЦИАЛА

А.Н. Васильев, П.И. Гордийчук

Резюме

В статье рассчитан профиль распределения плотности пространственно ограниченной жидкой системы с геометрией цилиндра при условии действия пристеночного потенциала, неоднородного вдоль оси цилиндра. Задача решена в общем случае, когда система находится под воздействием внешнего поля с радиальной симметрией, после чего анализируется частный случай пристеночного потенциала специального типа и выполняются числовые расчеты.

LIQUID DISTRIBUTION IN A CONFINED SYSTEM SUBJECTED TO A NONUNIFORM POTENTIAL

A.N. Vasilev^{1,2}, P.I. Gordiichuk¹

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv
(2, Academician Glushkov Prosp., Kyiv 03022, Ukraine;
e-mail: *vasilev@univ.kiev.ua*),

²National Technical University of Ukraine "KPI"
(16/2, Yangel' Str., Kyiv 03056, Ukraine)

Summary

We calculate the density distribution profile of a spatially confined liquid system with cylindrical geometry under the action of a wall potential nonuniform along the cylinder axis. The problem is solved in the general case where the system is subjected to the action of an external field with radial symmetry. We also analyze a particular case of the wall potential of a special kind and perform numerical calculations.