

УДК 539.22

ИДЕАЛЬНАЯ ТУРБУЛЕНТНОСТЬ В НЕЛИНЕЙНОЙ "КВАНТОВОЙ" ФИЗИКЕ ПОЛИМЕРОВ

Краснюк И.Б., Мельник Т.Н., Юрченко В.М.

*Физико-технический институт им. А.А. Галкина НАНУ, Донецк, Украина
E-mail: krasnjukigr@rambler.ru*

Рассматриваются краевые задачи для линейных систем уравнений Шредингера с нелинейными граничными условиями для волновых функций. При этом нелинейность в граничных условиях порождает возникновение поверхностных пространственно-временных структур, которые в дальнейшем проникают в ограниченную область, не изменяя формы. Эти структуры асимптотически неустойчивы под действием возмущений, но их "времена жизни" сравнимы с временем проведения эксперимента. В нелинейной оптике для идеальных оптических резонаторов такие (объемные) структуры известны и называются темными и светлыми солитонами. В нелинейной физике полимеров известны осциллирующие асимптотически стационарные структуры, которые называются ламеллярными структурами. Оказывается, что в полимерных цепях могут существовать пространственно-временные распределения ламеллярного типа, которые индуцируются поверхностными процессами кристаллизации или плавления полимерных цепей. Существенную роль при этом могут играть поверхностные нуклеирующие добавки.

Ключевые слова: полимерные цепи, нелинейная оптика.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время не вызывает удивления возникновение хаоса и различного рода фрактальных объектов в тех или иных областях естествознания. В частности, такие объекты возникают в теории эволюционных задач, задаваемых как обычными дифференциальными уравнениями (ОДУ), так и уравнениями в частных производных (УЧП). Однако, как отмечает А.Н. Шарковский (см., например, [1]), в случае УЧП, в силу бесконечномерности задачи, можно (и необходимо!) говорить не только о сложной динамике переходов между мгновенными состояниями системы (как в случае ОДУ), но и о сложной "внутренней архитектуре" самих состояний в каждый момент времени. В самом деле, именно усложнение "внутреннего" строения состояний динамической системы (ДС) в каждый момент времени приводит к пространственно-временной (а не к пространственной, как это общепринято) хаотизации системы, которую авторы [1] называют турбулентностью в широком смысле.

Эволюционные краевые задачи для УЧП порождают на пространстве начальных состояний бесконечномерные ДС сдвигов вдоль решений. Для уравнений параболического типа аттракторы соответствующих ДС являются конечномерными подмножествами фазового пространства (такая ситуация имеет место для уравнения Навье-Стокса [2]). Иная ситуация имеет место в случае краевых задач для уравнений гиперболического типа. Такие задачи порождают фазовые пространства, которые являются некомпактными, что приводит к тому, что

соответствующие ДС не имеют аттрактора в фазовом пространстве. Тем не менее, и для некомпактных фазовых пространств мы можем говорить о существовании "идеальных" аттракторов с простой динамикой: когда аттрактор состоит из неподвижных точек и циклов, но с очень сложной внутренней структурой самих "точек", из которых состоит аттрактор, так как эти точки являются элементами определенных функциональных пространств [2].

Если краевая задача порождает бесконечномерную ДС сдвигов, то теория одномерных отображений позволяет понять, почему и как в краевых задачах возникает и развивается турбулентность, и предложить сценарии возникновения самоорганизации и автостохастичности. Эти сценарии описаны в ряде математических работ А.Н. Шарковского (1983-2010). С точки зрения приложений к модельным краевым задачам физики твердого тела они реализованы теоретически в ряде работ [3]-[5]. Например, в [6] реализован сценарий возникновения жидко-кристаллических распределений и их последовательной хаотизации через бифуркации удвоения периода в ориентированных блок-сополимерных цепях. В [7] описан аналогичный сценарий возникновения жидко-кристаллических кластеров в окрестности неупорядоченной фазы для бинарных сплавов. В [3] предложен сценарий возникновения оптической турбулентности в задачах взаимодействия излучения с веществом (на примере Na - лазера).

Мы применяем указанные выше идеи и методы к реализации программы возникновения идеальной турбулентности в системах квантовых осцилляторов с нелинейными динамическими связями на границе оптической среды [4]. Теоретические результаты данной работы подтверждаются экспериментальными наблюдениями явлений самопереключения однонаправленных распределенно-связанных волн (ОРСВ). Теоретические основы явления ОРСВ с линейным коэффициентом связи изложены в [8]. Обзор явления самопереключения импульсов и теории самопереключения ОРСВ с нелинейным коэффициентом связи можно найти в [9].

Мы покажем как нелинейная перекачка света может реализоваться на границе оптической среды: в результате такого поверхностного обмена энергией возникают поверхностно-индуцированные темные и светлые солитоны [10] в объеме оптической среды. Динамические граничные условия (см. постановку задачи), моделирующие "самопереключение" света на границе резонатора, могут быть реализованы в технических устройствах с помощью дискретного оптического транзистора [9]. Мы ограничимся исследованием переключения излучения в квадратично-нелинейных оптических системах, которое математически моделируется с помощью логистического отображения (см. пример 1).

1. ПРОБЛЕМА ВЫБОРА МОДЕЛИ

Наноструктуры – это структуры, занимающие промежуточное положение между молекулами и микроскопическими объектами, то есть объектами порядка 1 мкм. В последнее время усилился интерес к построению моделей среды на наноуровне, которые называют мезоскопическими моделями сплошной среды. Это объясняется тем, что при описании наноструктур возникает проблема создания

адекватной, как математической, так и физической модели исследуемого объекта. При этом часто математическая модель не описывается дифференциальными уравнениями в частных производных [11]. Примером такой модели являются дифференциально-разностные уравнения (ДРУ) нейтрального типа [12]. К ДРУ сводятся нелинейные краевые задачи для уравнения Кана-Хиллиарда с "вязкостью" [13]. Это уравнение моделирует распределения жидко-кристаллических или аморфно-кристаллических "одномерных" кластеров в ограниченных несимметричных полимерных пленках [13]. При этом исходная краевая задача допускает редукцию к ДРУ с запаздывающим аргументом, которое, в свою очередь, при дополнительных требованиях вполне интегрируемости граничных условий [13], допускает редукцию к системе РУ с непрерывным временем.

Решения РУ на больших временах обладают свойством самоподобия (в частности, фрактальности). Свойство самоподобия возникает на промежуточном уровне между микро- и макроуровнями (то есть, на мезоуровне). Оказывается, что материалы, мезоскопическая структура которых обладает свойством масштабной инвариантности (скейлинга), имеют уникальные физические свойства, которые суть результат их внутренней самоподобной "архитектуры". Для подобного материала нельзя определить такое основное понятие, как плотность и, следовательно, для него нет адекватной математической модели [11]. Мы определим множество физических параметров, возникающих при кристаллизации и плавлении бинарных сплавов или полимерных смесей, изменение которых приводит к последовательности бифуркаций удвоения периода предельных решений (принадлежащих аттрактору краевой задачи), которые приводят, соответственно, к возникновению последовательности самоподобных структур релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа [13]. Существуют узкие области, занимающие значения параметров, при которых возникают фрактальные структуры с дробной размерностью Хаусдорфа. Примеры возникновения таких скейлинговых структур, возникающих при кристаллизации бинарных сплавов в аморфно-кристаллических пленках, можно найти в [7]. При этом мы используем классические модели физики полимеров.

2. КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ

В то же время, как показал Де Жэн [6], при моделировании идеальных полимерных цепей во внешнем потенциале можно использовать уравнение Шредингера: при этом одна конформация цепи соответствует одной выделенной траектории частицы, а волновая функция последней представляется когерентной суперпозицией амплитуд различных траекторий [6, 14, 4].

Пусть для определенности полимерная цепь вложена в решетку Флори-Хаггинса с параметром a . Тогда она описывается как некоторая траектория из N шагов, соединяющая точки x_0, \dots, x_N . Если на каждый мономер действует некоторый потенциал $U(x)$, то с этой конкретной реализацией ассоциируется статистический вес [6]

$$\exp\left(-\frac{1}{T}(U(x_0)+\dots+U(x_N))\right) \quad (1)$$

где T – температура. Рассмотрим сумму всех весов по траекториям с концами $x_0 = x'$ и $x_N = x$, где x' и x фиксированы. Назовем эту сумму величиной

$$2qz^N G_N(x', x) \quad (2)$$

где z – число соседей одного узла решетки. Множитель z^N представляет собой не что иное, как полное число траекторий из N – шагов. Функция $G_N(x', x)$ вещественна, положительна и симметрична: $G_N(x', x) = G_N(x, x')$. При $N = 0$ функция G_N сводится к дельта-функции $G_0(x', x) = \delta_{x'x}$. При рассмотрении дискретной решетки необходимо использовать дискретную дельта-функцию, которая в непрерывном пределе переходит в $\delta(x' - x)a^3$ (см. [6], с.277).

Легко получить уравнение для G_N , добавляя к цепи одно звено,

$$G_{N+1}(x', x) = \frac{1}{z} \sum_{x''} G_N(x', x'') \exp\left(-\frac{U(x'')}{T}\right) \quad (3)$$

где \sum означает суммирование по всем узлам, которые являются соседями узла x' . Если предположить, что величина $U(x)/T$, то это позволяет записать уравнение (3) для центрально симметричной решетки в виде

$$G_{N+1}(x', x) - G_N(x', x) \approx \frac{\partial G_N}{\partial N}(x', x) = -\frac{U(x)}{T} G_N(x', x) + \frac{a^2}{6} \frac{\partial^2 G_N(x', x)}{\partial x^2} \quad (4)$$

где x' можно рассматривать как параметр. Уравнение (4) удобно переписать в виде

$$-\frac{\partial G}{\partial N} = -\frac{a^2}{6} \frac{\partial^2 G_N}{\partial x^2} + \frac{U(x)}{T} G \quad (5)$$

Де Жен отмечает (см.[6], с.278), что уравнение (5), подобно уравнению Шредингера, где переменная N аналогична времени (не считая множителя i). Мы используем эту аналогию между статистикой идеальной цепи и задачами квантовой механики с целью показать формальное единство квантового описания (статистических) полимерных цепей и лазерных пучков в нелинейной оптике. При этом в оптике существуют асимптотические по малому параметру $\hbar \rightarrow 0$ решения, быстро убывающие вне некоторых точек, кривых и поверхностей. Тогда (во всяком случае, формально, аналогичные распределения должны существовать для ряда модельных задач физики полимеров.

Отметим, что для вычисления квазиклассической асимптотики в задачах механики узких лазерных пучков (в окрестности некоторой точки x конфигурационного пространства) необходимо учитывать все классические траектории, приходящие в данную точку (см. [14], с.15). Построение

асимптотических решений дифференциальных УЧП с малым параметром сводится к решению системы: уравнения Гамильтона-Якоби (уравнение характеристик) и уравнения переноса. Такую систему называют системой канонических уравнений или канонической системой.

В данной работе (помимо стандартных задач о существовании светлых и темных солитонов в задачах нелинейной оптики [14]) предлагается с помощью канонической системы моделировать также идеальные (и возможно, неидеальные) полимерные цепи. Концентрация таких цепей определяется по формуле

$$c(s) = N |\psi(s)|^2 \quad (6)$$

где N – число мономеров, $\psi(s)$ – волновая функция (Формула (6) имеет место потому, что в точке s сходятся две цепи, каждой из которых ставится в соответствие множитель ψ).

2.1. Постановка задачи

В качестве примера мы рассмотрим систему уравнений Шредингера, которая описывает взаимодействие двух идеальных цепей в объемном потенциале. Такая система описывает распределения концентрации для каждой из компонент А и В соответственно [13,7,15]. Математическая модель имеет вид [14, 4]

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} + V(x)\psi_k - \frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi_k = 0, \quad k = 1, 2, \quad (7)$$

\hbar – малый параметр, с начальными условиями

$$\psi_k(x, 0) = e^{iS_0^{(k)}(x)/\hbar} \psi_0^{(k)}(x) \quad (8)$$

и граничными условиями

$$W_j(\psi_1^2, \psi_2^2) = C_j, \quad j = 0, 1, \quad (9)$$

W_j – заданные функции, C_j – постоянные. Асимптотическое решение задачи с точностью до $O(\hbar^2)$ будем искать в виде

$$\psi_k = \exp(iS_0^{(k)}(x)/\hbar) \psi_0^{(k)}(x, t) \quad (10)$$

Подставляя функцию (10) в уравнения (7), (8), получаем, что

$$\left[\frac{\partial S_k}{\partial t} + V(x) + \frac{1}{2} (\nabla S_k)^2 \right] \psi_k + (-i\hbar) \left[\frac{\partial S_k}{\partial x} \frac{\partial \psi_k}{\partial x} + \frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \frac{1}{2} \psi_k \Delta S \right] + \frac{(-i\hbar)^2}{2} \Delta \psi_k = 0 \quad (11)$$

Для того, чтобы функция ψ_k вида (10) удовлетворяла асимптотически уравнениям Шредингера с точностью до $O(\hbar^2)$, достаточно, чтобы функции $S_k(x, t)$ являлись решениями задачи Коши для уравнений Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial S_k}{\partial t} + V(x) + \frac{1}{2}(\nabla S_k)^2 = 0, \quad S_k(x, 0) = S_0^{(k)}(x), \quad (12)$$

а $\psi_k(x, t)$ удовлетворяла задаче Коши для уравнений переноса [14]:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \frac{\partial \psi_k}{\partial x} \frac{\partial S_k}{\partial x} + \frac{1}{2} \psi_k \Delta S = 0, \quad \psi_k(x, 0) = \psi_0^k(x) \quad (13)$$

2.2. Определение фазы из уравнения Гамильтона-Якоби

Мы ограничимся исследованием случая $V(x) \equiv 0$, что приводит к уравнению Гамильтона-Якоби для "свободной частицы":

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = 0 \quad (14)$$

Решение уравнения (14) будем искать в виде $S(x, t) = \lambda_1 x + \lambda_2 t$, где λ_1, λ_2 - вещественные постоянные, удовлетворяющие (в силу уравнения (14)) требованию

$$\lambda_2 + \frac{1}{2} \lambda_1^2 = 0 \quad (15)$$

Соотношение $\lambda_1 = \alpha$ дает начальное условие для уравнения (14), которое можно записать в виде

$$S(x, 0) = S_0(x) = \alpha x \quad (16)$$

Уравнение (14) вместе с начальным условием (16) представляет собой задачу Коши для нелинейного уравнения Гамильтона-Якоби. Очевидно, что

$$S(x, t) = \alpha x - \frac{1}{2} \alpha^2 t \quad (17)$$

Выберем для искомой функции $\psi(x, t)$ начальное условие

$$\psi(x, 0) = \exp\left(\frac{i}{h}(\lambda_1 x + \lambda_2 t)\right) \phi_0(x) \quad (18)$$

где $\phi_0(x)$ - достаточно гладкая функция. Тогда

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{h}(\lambda_1 x + \lambda_2 t)\right) \phi(x, t) \quad (19)$$

где $i = \sqrt{-1}$, $h > 0$. В результате мы можем интерпретировать произведение $\psi \bar{\psi} = |\psi|^2$ как вероятность обнаружить данную случайную конфигурацию полимерной цепи с заданной плотностью. Разумеется, при асимптотическом распределении (при $t \rightarrow \infty$) одной из компонент бинарной смеси (это может быть система полимер-полимер, полимер-растворитель, растворитель-растворитель) конечное статистическое распределение зависит от плотности начальной конфигурации $\phi_0(x)$, то есть представляет собой условную вероятность

обнаружить конфигурацию в заданной точке пространства в некоторый момент времени.

Заметим, что структура начальных конфигураций очень важна, так как здесь имеется (часто наблюдаемая в гидродинамике [16]) чувствительная зависимость от начальных данных. Напомним, что системы, чувствительные к начальным условиям, ведут себя таким образом, что малые изменения начальных данных приводят к большим и непредсказуемым последствиям на больших временах. В этом смысле никакой регулярности на больших временах обнаружить не удастся. Как отмечают авторы [16], экспериментатор, исследующий поведение реальной системы, напрасно будет искать повторяющиеся траектории, поскольку (неизбежные) ошибки в начальных условиях (совместно с действующим на время эксперимента шумом) приведут к различным структурам при каждом повторении опыта.

2.3. Определение огибающей волнового пакета полимерных цепей

В результате при выборе линейной фазы уравнение переноса имеет вид:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial t} + \lambda_k^1 \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = 0, \quad k = 1, 2. \quad (20)$$

Из (20) вытекает уравнение

$$\frac{\partial \psi_k^2}{\partial t} + \lambda \frac{\partial \psi_k^2}{\partial x} = 0, \quad k = 1, 2. \quad (21)$$

Выберем $\lambda_1^{(1)} = \lambda > 0$, $\lambda_1^{(2)} = \lambda < 0$. Тогда систему (21) можно записать в виде двух гиперболических уравнений:

$$\frac{\partial \psi_1^2}{\partial t} + \lambda \frac{\partial \psi_1^2}{\partial x} = 0, \quad k = 1, 2, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \psi_2^2}{\partial t} - \lambda \frac{\partial \psi_1^2}{\partial x} = 0. \quad (23)$$

Поставим для решений системы (22, 23) граничные условия

$$\psi_1^2 = \psi_1^2, \quad \psi_1^2 = \Phi(\psi_1^2), \quad (24)$$

где $\Phi: I \mapsto I$ – заданная функция, которая преобразует некоторый открытый ограниченный интервал в себя. Будем искать решения краевой задачи в виде: $\psi_1^2 = f_1(t - x/\lambda)$, $\psi_2^2 = f_2(t + x/\lambda)$. Подстановка функций f_1, f_2 в граничные условия приводит к функциональным уравнениям

$$f_1(t) = f_2(t), \quad f_2(t + l/\lambda) = \Phi(f_1(t - l/\lambda)). \quad (25)$$

Выполним во втором из этих уравнений сдвиг $t \mapsto t + l/\lambda$. В результате получим разностное уравнение с непрерывным временем

$$f_2(t + 2l/\lambda) = \Phi(f_2(t)), \quad t \geq 0. \quad (26)$$

При подходящем выборе отображения Φ и начальных распределений решения уравнения (26) представляют собой асимптотически $2^N l/v$ – периодические функции, где N – наименьшее общее кратное периодов притягивающих циклов отображения Φ [13].

Известно, что нелинейные РУ (а, по существу, ДРУ с запаздывающим аргументом) допускают существование странных аттракторов. В свою очередь, из странности аттрактора вытекает его фрактальность (необходимое условие). Таким образом, фазовые портреты нелинейных хаотических систем представляют собой фракталы. Следовательно, огибающая колебаний волновой функции для рассматриваемой выше нелинейной краевой задачи для линейных уравнений Шредингера может иметь не столь простую структуру как это показано на рис.1 (для монотонного отображения Φ , которое имеет одну отталкивающую и две притягивающие неподвижные точки), а представлять собой график фрактального множества с дробной размерностью (в случае немонотонного или многозначного отображения Φ).

Каковы же сами распределения волновых функций, если их огибающие имеют столь сложную структуру (гомеоморфную несчетному нигде не плотному множеству Кантора второй категории по Бэру)?

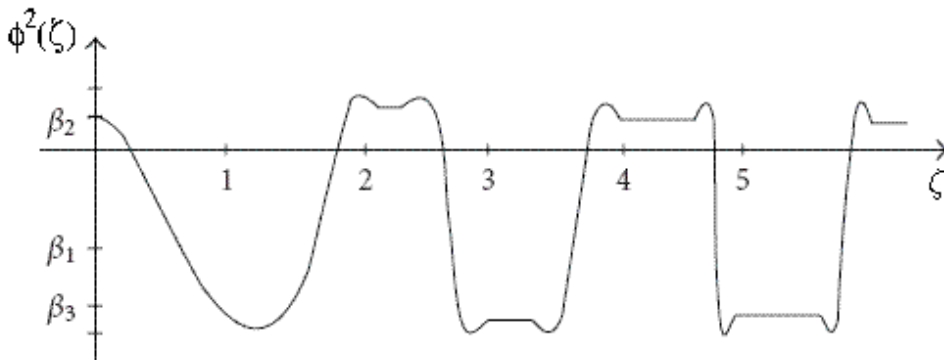


Рис. 1. Огибающая колебаний плотности одной из компонент "квантованной" полимерной цепи. β_1 – отталкивающая неподвижная точка отображения, порождаемого разностным уравнением (26); β_2, β_3 – притягивающие неподвижные точки; $\zeta = t - x/v$, где v – скорость распространения оптических солитонов (в нелинейной оптике или скорость распространения кристаллической фазы в физике полимеров; x – координата фронта распространения бегущей волны.

3. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Граничные условия (24) имеют простой физический смысл в задачах нелинейной оптики. В самом деле, если $\psi = J$, где J – интенсивность излучения,

$$J(x, t) = |J(x, t) \exp(kx - \omega t)| \quad (27)$$

k – волновой вектор, направленный вдоль оси x ; ω – частота приложенного поля, то функциональные граничные условия определяют связь между мощностью падающего и отраженного излучения (квадратами амплитуд падающей и отраженной волн излучения [3]. Такую связь можно реализовать на эксперименте при помощи нелинейного оптического преобразователя – аналога нелинейного туннельного диода в электрической цепи [12].

При моделировании полимерных цепей физическая интерпретация функциональных граничных условий не столь тривиальна, поскольку непонятно как реализовать на эксперименте взаимосвязь между квадратами плотностей полимерных цепей A и B . Однако такая связь между амплитудами вытекает из дифференциальных граничных условий, которые можно реализовать на эксперименте с помощью поверхностного циклического нагрева и охлаждения (при этом температуру мы будем рассматривать как бифуркационный параметр). Соответствующие граничные условия определяют скорость образования поверхностной упорядоченной фазы на поверхности образца, которая в дальнейшем проникает в объем образца, не изменяя своей формы. [13, 15, 7]).

Тогда функциональные граничные условия допускают физическую интерпретацию, если предположить, что рассматриваемая краевая задача включена в семейство краевых задач с дифференциальными граничными условиями вида:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t}(0, t) = F_1(\psi_1(0, t), \psi_2(0, t)), \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial t}(0, t) = F_2(\psi_1(0, t), \psi_2(0, t)) \quad (28)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t}(l, t) = F_1(\psi_1(l, t), \psi_2(l, t)), \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial t}(l, t) = F_2(\psi_1(l, t), \psi_2(l, t)) \quad (29)$$

F_1, F_2, G_1, G_2 – заданные функции, зависящие от поверхностной энергии активации, нуклеирующих добавок, температуры как параметра и других параметров задачи [13, 15, 7]. Граничные условия (28), (29) имеют простой физический смысл, так как левые части уравнений (28), (29) определяют скорости изменения поверхностных плотностей кристаллической (или жидкой) фазы соответственно. Эти скорости, в свою очередь, пропорциональны вероятностям образования кристаллитов (или вероятностям их плавления) на плоских стенках, ограничивающих бинарную смесь.

Покажем, что имеет место редукция от дифференциальных граничных условий, имеющих простой физический смысл, к функциональным граничным условиям. Для этого предположим, что система ОДУ (28) допускает интеграл

$$W_1(\psi_1^2(0, t), \psi_2^2(0, t)) = \mu_1 \quad (30)$$

а система (29) – интеграл

$$W_1(\psi_1^2(0,t), \psi_2^2(0,t)) = \mu_2 \quad (31)$$

μ_1, μ_2 – постоянные, которые определяются из начальных условий так, что:

$$\mu_1 = W_1(\psi_1^2(0,0), \psi_2^2(0,0)) \quad (32)$$

$$\mu_2 = W_1(\psi_1^2(0,t), \psi_2^2(0,t)) \quad (33)$$

Пусть существует открытый ограниченный интервал $I \in R^1$ такой, что для всех $\psi_1, \psi_2 \in I$ при каждом $t > 0$ функциональные соотношения (32), (33) глобально разрешимы (возможно, неоднозначно) таким образом, что

$$\psi_1^2(0,t) = \Phi_{1,\mu_1}(\psi_2(0,t)), \quad \psi_2^2(l,t) = \Phi_{2,\mu_2}(\psi_1(l,t)) \quad (34)$$

где $\Phi_{1,\mu_1}, \Phi_{2,\mu_2} : I \rightarrow I$ – некоторые достаточно гладкие структурно-устойчивые отображения. Пусть $\Phi_{1,\mu_1} := Id$, где Id – тождественное отображение; $\Phi_2 = \Phi_{2,\mu_2}$.

В результате мы приходим от дифференциальных граничных условий (физическая интерпретация которых понятна) к функциональным граничным условиям.

4. УСЛОВИЕ МАЛОСТИ ПОТЕНЦИАЛА

Выберем нормировку $c = \psi^2$, где c – концентрация. Тогда самосогласованный потенциал можно записать в виде

$$U(x) = Tvc(x) = T\mathbf{v}|\psi(x)|^2 \quad (35)$$

где \mathbf{v} – параметр исключенного объема. В уравнении Гамильтона-Якоби следует положить $V(x) = U(x)/T$, что приводит к уравнению

$$\frac{\partial S_k}{\partial t} + \mathbf{v}|\psi_k|^2 + \frac{1}{2}(\nabla S_k)^2 = 0, \quad S_k(x,0) = S_0^{(k)}(x), \quad (36)$$

здесь $\mathbf{v} = a^3(1-2\kappa)$ – параметр исключенного объема, κ – параметр Флори-Хаггинса. В большинстве случаев параметр κ положителен. Это объясняется тем, что взаимодействия (мономер-мономер, мономер-растворитель, растворитель-растворитель) сводятся к вандерваальсову притяжению [15]. В уравнении (36) величина $\mathbf{v}|\psi|^2 = \mathbf{v}c$ безразмерна, так как безразмерна величина \mathbf{v} ([6], с.275). Это означает, что $|\psi|^2$ имеет размерность a^{-n} , где n – размерность пространства.

Следовательно, мы должны выполнить нормировку $\psi \mapsto \psi/\psi_0$. При исследовании флуктуаций концентрации в окрестности среднего состава можно положить $|\psi_0|^2 = 1/2$. Таким образом, структуры релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типа (в данном идеальном случае) являются поверхностно-индуцированными структурами в идеальных цепях.

При этом следует отметить, что в конфигурационной статистике макромолекул их цепное строение и (связанный с ним) эффект исключенного объема играют ведущую роль. Этот эффект означает, что в одном и том же элементе объема пространства не может находиться более одного звена (или мономера) одновременно (см. [17]). Эффект исключенного объема является эффектом дальнего порядка, так как доминирующую роль при формировании пространственной конфигурации макромолекулы играет объемное взаимодействие ее мономеров с большими разностями их порядковых номеров на полимерной цепи.

Взаимодействие между любыми (двумя) мономерами, соединенными между собой более чем одним звеном, можно описать короткодействующим потенциалом отталкивания $U(x)$ с радиусом действия x_0 , который не превосходит длину одного звена (то есть при $x_0 < l$, где l – длина звена). Тогда выражение

$$v_0 = \int (1 - \exp(-U(x)/T)) d^n x \quad (37)$$

определяет величину исключенного объема в n – мерном пространстве. Здесь T – абсолютная температура, выраженная в энергетических единицах.

Таким образом, предположение о малости U/T означает малость параметра исключенного объема v_0 . Согласно [17] (в большинстве случаев), неравенство $U/T \ll 1$ может быть оправдано, так как величиной порядка единицы является величина NU/T , а не U/T . Тем не менее, представленный в данной статье метод получения пространственно-временных колебаний для концентрации $c = \psi^2$ имеет место лишь для идеальных цепей. Проблема учета реальных значений $U/T \sim 1$ остается открытой.

5. ПРИМЕР

В качестве примера используем параболу $f_\lambda: u \mapsto \lambda u(1-u)$, $u \in [0,1]$, $0 < \lambda \leq 4$, где параметр λ характеризует нелинейный коэффициент связи между двумя (падающей и отраженной) оптическими волнами (см., например, [3]). При $1 + \sqrt{6} < \lambda < \lambda^*$, где $\lambda^* = 3.57$ – значение λ , которое является предельным для бифуркационных значений удвоения периода, отображение f_λ имеет циклы периодов $1, 2, 2^2, \dots, 2^k$ где $k > 1$. При $\lambda > \lambda^*$ отображение f_λ имеет цикл, отличный от степени 2, порождает слабую идеальную турбулентность в первом случае [18] и идеальную турбулентность – во втором случае [19].

Под идеальной турбулентностью мы будем понимать турбулентность в системах без внутреннего сопротивления [18]. Понятие идеальной турбулентности предложено А.Н. Шарковским (1983). При этом первоначально использовалось понятие "сухая турбулентность" [1, 20, 21] (по аналогии с "сухой водой" Фейнмана

[22]. В научной терминологии понятие турбулентность идеальная представлено в [23].

Будем говорить, что начальное состояние $\phi \in C^l$, где C^l – пространство l – раз дифференцируемых функций, порождает идеальную турбулентность, если найдется функция $g \in \omega^\Delta[\phi]$, график которой является фрактальным. Здесь $\omega^\Delta[\phi]$ есть непустое компактное ω – предельное множество. При этом типична ситуация, когда некоторые (а возможно, и все) "точки" множества $\omega^\Delta[\phi]$ являются полунепрерывными сверху (то есть, разрывными) функциями. Следовательно, их графики могут оказаться фрактальными: точнее, для $\xi \in \omega^\Delta[\phi]$ какая-либо из фрактальных размерностей $graph \xi$ больше топологической размерности области D – области определения функции $\xi(y)$.

Будем говорить, что имеет место слабая идеальная турбулентность, если ϕ не порождает идеальную турбулентность (то есть график предельной функции как элемента аттрактора не является фрактальным), но существует функция $\xi \in \omega^\Delta[\phi]$, которая является разрывной на бесконечном множестве точек из области ее определения D : то есть на бесконечном множестве точек $y' \in D$ значения функции $\xi(y)$, принадлежащие 2^E , не являются одноточечными множествами. Это означает, что E может быть интервалом.

Наконец, имеет место третий случай, когда существует множество $\Lambda \in (\lambda^*, 4]$ положительной меры Лебега такое, что f_λ при $\lambda \in \Lambda$ имеет единственную гладкую эргодическую инвариантную меру. Тогда динамическая система порождает слабую идеальную турбулентность. В частности, отображение $u \mapsto 4u(1-u)$ имеет инвариантную меру с плотностью $p(u) = 1/\pi\sqrt{u(1-u)}$ и носителем $[0,1]$. В этом случае для каждой несингулярной функции $\phi \in C^l$ предельное множество $\omega^\#[\phi]$ состоит из единственной случайной функции (с независимыми значениями) $\xi^*(y)$, которая задается не зависящей от y функцией распределения

$$F_\xi(u, y) = \int_0^u p(s) ds = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{u} \quad (38)$$

и глобальный аттрактор $A^\#$ состоит из одной траектории – точки ξ^* [19].

Список литературы

1. Шарковский А.Н. Колебания, описываемые автомодельными разностными и дифференциально-разностными уравнениями / Шарковский А.Н. // Proc. VIII Int. Conf. Nonlinear Oscillations – 1978. – V. 2. – P. 1073-1078.
2. Ладыженская О.А. О нахождении глобального аттрактора для уравнения Навье-Стокса и других уравнений с частными производными / Ладыженская О.А. // Успехи мат. наук. – 1987. – Т. 42б. – С. 25-60.

3. Краснюк І.Б. Возникновение стохастических структур под действием спонтанного излучения / Краснюк І.Б., Рискиев Т.Т. // Оптика и спектроскопия. – 1993. – Т. 75. – № 3. – С. 517-527.
4. Краснюк І.Б. Решения предтурбулентного типа в задачах квантовой механики / Краснюк І.Б., Стрельцов А.А. // Узбекский физический журнал. – 1994. – № 1. – С. 12-18.
5. Краснюк І.Б. Нелинейные граничные задачи для уравнения Больцмана: периодические решения и их бифуркации / Краснюк І.Б. // Теоретическая и математическая физика. – 1997. – Т. 110. – № 2. – С. 323-333.
6. Де Жен П. Идеи скейлинга в физике полимеров / Де Жен П. – М.: Мир, 1982. – 368 с.
7. Каскадный процесс кристаллизации расплава / Краснюк І.Б., Таранец Р.М., Стефанович Л.И., Юрченко В.М. // Материаловедение. – 2008. – № 7. – С. 50-58.
8. Майер А.А. Экспериментальное наблюдение явления самопереключения однонаправленных распределенно-связанных волн / Майер А.А. // Успехи физических наук. – 1996. – Т. 166. – № 11. – С. 1171-1196.
9. Майер А.А. Оптическое самопереключение однонаправленных распределенно-связанных волн / А.А. Майер // Успехи физических наук. – 1995. – Т. 165. – С. 1037-1075.
10. Incoherently coupled dark-line bright soliton pair / J. Liang, Y. Wu, L. Yan. S. Pair // Chinese Journal of Physics. – 2008. – V. 46. – No. 4. – P. 425-429.
11. Бондаренко А.Н. Дис. д-ра физ.-мат. наук: 05.13.18, Новосибирск. – 2005, 308 С, РГБ ОД, 71:06-1/114.
12. Шарковский А.Н. Разностные уравнения и их приложения / Шарковский А.Н., Майстренко Ю.Л., Романенко Е.Ю. – Киев: Наукова думка, 1980. – 237 с.
13. Krasnyuk I.B. The Spatiotemporal Oscillations of Order Parameter for Isothermal Model of the Surface-Directed Spinodal Decomposition in Bounded Binary Mixtures / Krasnyuk I.B., Taranets R.M. // Research Letters in Physics. – 2009. – Article ID 250203, doi:10.1155/2009/250203).
14. Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях / Маслов В.П. – М.: Наука, 1977. – 384 с.
15. Краснюк І.Б. Колебания концентрации в ограниченных бинарных смесях с учетом поверхностных эффектов / Краснюк І.Б., Стефанович Л.И., Юрченко В.М. // Журнал технической физики. – 2007. – Т. 77, № 11. – С. 55-63.
16. Йорк Дж.А. Хаотическое поведение и гидродинамика, В кн.: Гидродинамические неустойчивости и переход к турбулентности / Йорк Дж.А., Йорк Э.Д. [под редакцией Суинни Х., Голлаба Дж.]. – М.: Мир, 1984. – С. 101-123.
17. Алхимов В.И. Эффект исключенного объема в статистике самоизбегающих блужданий / Алхимов В.И. // Успехи физических наук. – 1994. – Т. 164, № 6. – С. 561-601.
18. Cooke K.L. Differential difference equations and nonlinear initial-boundary-value problems for linear hyperbolic partial differential equations / Cooke K.L., Crumme D. // J. Math. Anal. and Appl. – 1968. – V. 24. – P. 372-387.
19. Романенко Е.Ю. Динамические системы и моделирование турбулентности / Романенко Е.Ю. // Украинский математический журнал. – 2007. – Т. 59, № 2. – С. 217-230.
20. Sharkovsky A.N. "Dry" turbulence" / Sharkovsky A.N. // Short. Comm. Int. Congr. Math. – 1983. V. 10(12). – P. 4.
21. Sharkovsky A.N. "Dry" turbulence" / Sharkovsky A.N. // Proc. Int. Workshop "Nonlinear and Turbulent Processes in Physics". – 1984. – V. 3. – P. 1621-1626.
22. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике / Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. – М.: Мир, 1977. – Т. 7 – 421 с.
23. Encyclopedia of Nonlinear Science / [ed. by Alwyn Scott] – New York, Rontledge, 2005.

Краснюк І.Б. Ідеальна турбулентність в нелінійній "квантовій" фізиці полімерів / Краснюк І.Б., Мельник Т.М., Юрченко В.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 94-107.

Розглядаються крайові задачі для лінійних систем рівнянь Шредингера з нелінійними граничними умовами для хвильових функцій. При цьому нелінійність в граничних умовах породжує виникнення поверхневих просторово-часових структур, що в подальшому проникають до обмеженої області, не

змінюючи форми. Ці структури є асимптотично нестійкими під впливом збурень, та їхні "часи життя" є порівнянними з часом проведення експерименту. В нелінійній оптиці для ідеальних оптичних резонаторів такі (об'ємні) структури відомі і називаються темними і світлими солітонами. В нелінійній фізиці полімерів відомі асимптотично стаціонарні структури, що осцилюють, які називаються ламелярними структурами. Виявляється, що в полімерних ланцюгах можуть існувати просторово-часові розподіли ламелярного типу, що indukуються поверхневими процесами кристалізації або розплаву полімерних ланцюгів. Істотну роль при цьому можуть відігравати поверхневі нуклеируючі домішки.

Ключові слова: полімерні ланцюги, нелінійна оптика.

Krasnyuk I.B. Ideal turbulence in nonlinear "quantum" physics of polymers / Krasnyuk I.B., Melnik T.N., Yurchenko V.M. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 94-107.

The boundary-value problem for linear Schredingers equations with nonlinear conditions for wave functions has been considered. The boundary conditions produce surface spatial-temporal structures entering the volume of pattern which is ideal optical resonator or ideal mixture. The structures are asymptotically unstable but they exist on the times that are comparable with times of experiments. In optic such structures are known as dark and white solitons. In polymer physics an oscillating asymptotically stationary structures also are known as lamellar structures. It will be proved that for polymer blends there are surface-induced spatial-temporal structures of the lamellar type that may be produced by the surface processes of crystallization or melting.

Keywords: polymer chains, nonlinear optics.

Поступила в редакцію 09.11.2010 г.