

РАСЧЕТ ЛОКАЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ ЗАЗОРАХ МЕТОДОМ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

**Ю.В.Аграфонов, Н.А. Зеленцов, И.А.Меленчук, В.С. Петрушин,
И.С.Петрушин , М.Ю. Просекин, И.Г. Просекина**

*Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, К.Маркса 1,
agrafonov@physdep.isu.ru*

Статистическое рассмотрение пространственно-неоднородных жидкостей основывается либо на цепочке уравнений Боголюбова, либо на системе уравнений для одночастичной $G_1(\vec{r}_1)$ и двухчастичной $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ функций распределения [1]. Знание этих функций позволяет рассчитать микроструктуру жидкости – локальную плотность и ближний порядок, а также все макроскопические характеристики - поверхностное натяжение, адсорбцию, расклинивающее давление и т.д.

Для жидкости, контактирующей с одной твердой поверхностью, граничным условием является переход вдали от поверхности к объёмной жидкости

$$G_1(z_1) \xrightarrow{z_1 \rightarrow \infty} 1, \quad \lim_{\substack{z_1 \rightarrow \infty, z_2 \rightarrow \infty \\ r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = const}} G_{12}(z_1, z_2, r_{12}) = G_{12}^{(0)}(r_{12}) \quad (1)$$

Выполнить второй предельный переход в (1) довольно сложно. Поэтому обычно используется синглетное приближение: двухчастичная функция распределения заменяется граничным значением $G_{12}^{(0)}(r_{12})$. В результате получается замкнутое уравнение [2,3] для одночастичной функции $G_1(z_1)$.

Для жидкостей в плоскопараллельном зазоре наноразмерной толщины оба граничных условия не выполняются, так как отсутствует предельный переход к объёмной жидкости вдали от ограничивающих поверхностей. В этом случае обе функции будут зависеть не только от координат задающих положение частиц, но и от ширины зазора H . Тем не менее, оставаясь в рамках синглетного приближения, можно получить уравнение для одночастичной функции распределения, параметрически зависящей от толщины зазора $G_1(z_1, H)$. Решение полученного уравнения позволит проанализировать зависимость термодинамических характеристик от ширины зазора H .

Работа выполнена при частичной поддержке ГРНТИ–091-03-106, государственного контракта ГК П1919 и РНП 2.2.2.1/3297.

Список литературы

1. Саркисов Г.Н. // УФН, 2002, том 172, № 6, с. 647- 658.
2. D.A.Tikhonov at all // J. of Molecular Liquids, 1999, vol.82, 3- 17.
3. Аграфонов Ю.В.и др. //Известия РАН, Серия физическая, 2007, том 71, №2, с. 186-188.