

Здесь h_i – численные коэффициенты, δ – малый параметр, характеризующий величину диссипаций в системе, u – температура газа.

Вследствие потери энергии при соударениях температура газа постепенно уменьшается. Функция распределения частиц газа по скоростям может быть представлена в виде разложения по присоединенным полиномам Лагерра (здесь скорости частиц нормированы на некоторую характерную термическую скорость, которая уменьшается с течением времени вследствие диссипации):

$$\tilde{f}(\mathbf{c}, t) = A(t)\varphi(c)\left(1 + \sum a_p(t)S_p(c^2)\right).$$

Здесь $\varphi(c)$ – распределение Максвелла, $a_p(t)$ – коэффициенты, зависящие от времени, полностью определяющие поведение функции распределения частиц по скоростям.

Часть функции распределения, соответствующая большим скоростям, оказывается перенаселенной и описывается затухающей экспонентой:

$$\tilde{f}(\mathbf{c}, t) = B(t)\exp(-\psi(t)c)$$

В настоящей работе исследуется эволюция температуры и функции распределения частиц по скоростям в гранулярном газе, а также диффузия частиц. Температура спадает с течением времени по степенному закону $\sim t^{-5/3}$. Коэффициент диффузии гранулярных частиц, соударяющихся с потерей энергии, также уменьшается с течением времени по закону $\sim t^{-5/6}$. Если исходное распределение частиц по скоростям является максвелловским, то функция распределения частиц по скоростям эволюционирует таким образом, что ее отклонение от максвелловского распределения увеличивается, достигает максимума, а затем снова стремится к нулю.

Список публикаций:

[1] Brilliantov N.V. and Poeschel T., *Kinetic theory of granular gases*, **Clarendon Press. Oxford.** 2003.

Решение уравнения шредингера для осциллятора с дополнительным метастабильным положением равновесия

Бруева Кристина Владимировна

Витебский государственный технологический университет

Дунина Елена Брониславовна, к.ф.-м.н.

L.Dun@mail.ru

В настоящее время много внимания уделяется конформационному анализу. Молекулы в разных конформационных состояниях имеют одинаковый атомный состав и переходят друг в друга при повороте группы атомов на определенный угол [1]. Наибольшее разнообразие конформационных состояний образуют органические молекулы. Изучение возможных конформационных состояний и исследование влияния конформационных эффектов на свойства вещества важная экспериментальная и теоретическая задача структурного анализа.

Компьютерные расчеты функции потенциальной энергии показывают, что разным конформационным состояниям соответствуют локальные минимумы различной глубины [2]. Локальные минимумы отделены друг от друга потенциальными барьерами. Высота барьера может изменяться в широких пределах от 8.7 до 49.6 кДж/моль. Глубокие минимумы соответствуют вполне стабильным конформациям. Тогда как минимумы, отделенные невысокими барьерами, отвечают метастабильным состояниям с не очень большим временем жизни.

В данной работе анализируется влияние дополнительного метастабильного минимума на колебательные свойства молекул.

Разрешенные значения энергии осциллятора и соответствующие волновые функции определялись из решения уравнения Шредингера в энергетическом представлении. В качестве базисных были выбраны функции невозмущенного осциллятора. Вид таких функций для любого номера n легко программируется в «MAPLE». Потенциальная кривая с дополнительным метастабильным уровнем моделировалась суперпозицией параболической и гауссовской функции. При таком выборе потенциальной кривой матричные элементы гамильтониана на базисных функциях вычисляются на языке «MAPLE» в аналитической форме.

После диагонализации матрицы гамильтониана и определения коэффициентов волновой функции в энергетическом представлении были построены графики плотности распределения координат для всех рассматриваемых уровней. Графики наглядно демонстрируют следующее:

- распределение симметрично относительно главного минимума для колебаний с энергией значительно меньшей энергии метастабильного состояния;
- распределение сильно ассиметрично для колебаний с энергией близкой к энергии метастабильного состояния.

Ассиметрия в распределении плотности вероятности означает, что колебания происходят относительно смещенного положения равновесия. Такое смещение возможно в результате статической деформации молекулы.

Список публикаций:

[1] Пышкин О.С., *Физика низких температур*, т. 33, № 12, 1411-1413 (2007)

[2] Потемкин В.А., Максаков В.А., Корнев В.С., http://jsc.che.nsk.su/jsc_rus/2005-t46/nl/7_Full.htm

О движении пробных тел в центрально-симметричном гравитационном поле

Бушков Степан Сергеевич

Марийский государственный университет

Мубаракишин Искандер Рахимович, к.ф.-м.н.

mubair@mial.ru, dada_stuart@mail.ru

Как известно, орбиты пробных тел в центрально-симметричном поле (задача Кеплера) согласно классической механики описываются уравнением

$$\frac{d^2U}{d\varphi^2} + U = \frac{\beta}{h^2},$$

где $U = \frac{1}{r}$, r и φ - полярные координаты, β и h - некоторые константы. В случае финитного движения орбита представляет собой эллипс. В 1859 году У. Лаверье, обрабатывая многолетние наблюдения за движением Меркурия, обнаружил необъяснимое смещение перигелия орбиты. Различные попытки модифицировать закон тяготения Ньютона в рамках классической физики не имели успеха. С появлением общей теории относительности (ОТО), релятивистской теории тяготения, одной из первых рассмотренных задач стала задача Кеплера. Полученное в ОТО уравнение орбиты

$$\frac{d^2U}{d\varphi^2} + U = \frac{\beta}{h^2} + 3\beta U^2$$

отличается от классического дополнительным слагаемым $3\beta U^2$, которое дает необходимое смещение перигелия, необъяснимое с точки зрения классической механики. Вопрос же о природе дополнительного смещения, какие физические факторы за него отвечают, остается открытым.

В данной работе показано, что если дополнить ньютоновскую теория тяготения минимальными полевыми представлениями, то без изменения самого закона тяготения появляется смещение перигелия орбит, согласующееся по порядку величины с наблюдаемым.

Если гравитационное поле материально, то оно должно обладать плотностью энергии и полевой массой:

$$w = -\frac{G^2}{8\pi\gamma}, \mu_{пол} = \frac{w}{c^2} = -\frac{G^2}{8\pi\gamma c^2}.$$

Учет полевой массы в рамках классической механики приводит к уравнению орбиты вида

$$\frac{d^2U}{d\varphi^2} + \left(1 - \frac{\beta}{p}\right)U = \frac{1}{p},$$