

ПРИМЉЕНО	10 XI 1998.
ОРГАНИЗЈЕД	
0603	9/295

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

DIPLOMSKI RAD

DISIPATIVNI EFEKTI U POLIMERNIM
STRUKTURAMA SA NERAVNOMERNOJ
RASPODELOM MASA

MENTOR
Dr Ljiljana Mašković
vanredni profesor

KANDIDAT
Jasmina Mrkić

Novi Sad, 1998. godine

Najtoplje se zahvaljujem svom mentoru Dr. Mašković Ljiljani, vanrednom profesoru Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, koja je svojim znanjem i korisnim sugestijama doprinela da ovaj rad bude uspešno završen.

Takođe se zahvaljujem svojoj porodici za pruženu moralnu podršku.

S A D R Ž A J

1. UVOD	3
2. STRUKTURE SA RAVNOMERNOM RASPODELOM MASA	5
2.1. Metod Grinovih funkcija i formalizam translatornih operatora	5
2.2. Fizičke karakteristike	9
3. STRUKTURE SA NERAVNOMERNOM RASPODELOM MASA	13
3.1. Metod analize	13
3.2. Unutrašnja energija strukture	15
Z A K Lj U Č A K	19
L I T E R A T U R A	20

1. U V O D

Analiza struktura sa narušenom simetrijom, odnosno struktura sa neravnomernom raspodelom masa je skopčana sa nizom teškoća. Kao što je poznato, takve strukture ne poseduju translatornu invarijantnost, pa je nemoguće izvršiti njihovu teorijsku analizu poznatim metodama koje se koriste u teoriji kristala.

Pravi predstavnici ovakvih struktura su polimerni materijali. Većina polimernih struktura nije sastavljena od identičnih strukturnih jedinica, pa do narušenja translatorne invarijantnosti veoma često dolazi zbog neravnomerne raspodele masa tih strukturnih jedinica. Neravnomerna raspodela masa dovodi do nejednakih rastojanja izmedju njihovih centara masa.

Značajnija analiza struktura sa nejednakim rastojanjima izmedju centara masa izvršena je statističkim metodom datim u [1], koja je dala dobre rezultate za niz fizičkih karakteristika polimera. Takođe treba istaći statistički metod dinamičke raspodele masa izložen u radu [2], koji primenom na složenu polimernu strukturu gde su strukturne jedinice bile različitih masa, a rastojanja između njih ista, omogućio određivanje fizičkih karakteristika koje zavise od mase, kao i njihovu zavisnost od temperature. Postoji i niz drugih teorijskih metoda analize, pored gore navedenih, koji su dali rezultate čije je slaganje sa eksperimentom vidno. To su metodi na bazi Fejmanovih dijagrama i funkcionalnih integrala, metod renormalizacionih grupa, metod skejlinga i razni metodi numeričke analize. Kada su u pitanju teorijske metode analize, treba naglasiti da su dobijene vrednosti fizičkih karakteristika uglavnom približne.

Za razliku od teorijskih metoda analize, eksperimentalni metodi su znatno uspešniji. Ovo je razumljivo jer su polimerni materijali našli široku i neposrednu primenu i predstavljaju predmet veoma intenzivnih eksperimentalnih istraživanja.

Teorijske analize polimernih materija nalaze na niz teškoća čiji uzrok leži u obilju najraznovrsnijih konfiguracija polimera u polimernom materijalu. Polimeri su sastavljeni od dugolančanih makromolekula. Važno je istaći da je upravo makromolekul onaj specifični nivo strukture materije koji polimere čini posebnom klasom materije. Makromolekul je gigantski molekul sa atomima tako organizovanim da taj molekul predstavlja tvorevinu izgradjenu ponavljanjem karakterističnih

strukturnih jedinica koje se zovu *meri*. U makromolekulu može biti različit broj mera. Broj tipova mera u jednom makromolekulu je mali. Najčešće se radi o samo jednoj vrsti mera.

Kako polimerni materijal može biti kombinacija polimer - polimer, polimer - metal, polimer - keramika i sl., analiza ovakvih komplikovanih struktura je očigledna. Da bi se dobili makar i približni rezultati karakteristika ovakvih struktura, problem mora biti sveden na analizu strukture u jednoj dimenziji. Tako pomenuta jednodimenzionalna struktura može biti svedena na strukturu sa jednakim razmacima izmedju molekula, ali sa neravnomernom raspodelom masa, ili suprotno. Na osnovu dobijenih rezultata u idealnoj jednodimenzionalnoj strukturi, moguće je izvesti zaključke kako će se pojedine fizičke karakteristike ponašati u realnoj strukturi, odnosno strukturi koja ne poseduje translatornu invarijantnost. Treba napomenuti da se na idealnu strukturu mogu primeniti metodi analize iz teorije kristala.

Molekulska masa je jedna od najvažnijih karakteristika polimernih struktura. Ona je jednoznačna karakteristika pojedinog makromolekula. Međutim, polimer je najčešće polidisperzni sistem sastavljen od makromolekula različitog stepena polimerizacije. Zbog toga je potrebno ovakav sistem definisati pomoću srednje vrednosti mase. Srednja vrednost molekulske mase i stepen polidisperznosti, odnosno raspodela molekulske mase polimera ima veliki uticaj na fizička svojstva polimernih struktura.

Za analizu efekata neravnomerne raspodele masa, u ovom radu biće korišćen formalizam translatornih operatora i metod Grinovih funkcija. Radi demonstracije mogućnosti ovog formalizma, on će najpre biti primenjen na idealnu jednodimenzionalnu rešetku sa ravnomernom raspodelom masa. Potom će se na isti način tražiti termodinamičke karakteristike polimernih struktura sa neravnomernom raspodelom masa. Cilj ovoga rada je da se pokaže da primena navedenog formalizma može da dovede do rešenja za unutrašnju energiju i entropiju i pokaže da neravnomerna raspodela masa uslovjava kvaziperiodično ponašanje unutrašnje energije i entropije od temperature.

2. STRUKTURE SA RAVNOMERNOM RASPODELOM MASA

Analize koje se u ovom delu vrše odnose se na jednodimenzionalne strukture sa ravnomernom raspodelom masa. Primenom postupka koji je dat u radu [1], kako je već rečeno, problem je moguće svesti na analizu ekvivalentnog lanca sa jednakim razmacima izmedju molekula, ali sa nejednakim masama. Ovde se još uzima i da su mase strukture jednake.

Za analizu fizičkih karakteristika jednodimenzionalne rešetke sa ravnomernom raspodelom masa biće korišćen formalizam translatorynih operatora. Ovaj metod se može primeniti prilikom analize Grinovih funkcija sistema sa ravnomernom raspodelom masa. Strukture sa ravnomernom raspodelom masa moguće je analizirati i nizom drugih teorijskih metoda. Međutim, ovaj metod ćemo primeniti na strukture sa ravnomernom raspodelom masa samo da bi izvršili njegovo testiranje i pokazali opravdanost primene na strukture sa neravnomernom raspodelom masa. Iz tog razloga će u sledećem delu biti izneti detalji celokupnog metoda, a to će nam omogućiti lakšu analizu struktura sa neravnomernom raspodelom masa, što je i krajnji cilj ovog rada.

2.1. METOD GRINOVIH FUNKCIJA I FORMALIZAM TRANSLATORNIH OPERATORA

Statistički metod koji koristimo za određivanje fizičkih karakteristika sistema sa ravnomernom raspodelom masa sastoji se u primeni metoda dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija i metoda translacionih operatora.

Metod translatorynih operatora primenjuje se na idealne jednodimenzionalne strukture koje su opisane hamiltonijanom:

$$H = \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2M} + \frac{C}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right] \quad (1)$$

koji predstavlja Hamiltonian mehaničkih oscilacija. Ovde su:

u_n - molekulski pomeraji, p_n - impulsi

M - molekulske mase, C - Hukova konstanta elastičnosti na istezanje

Za ispitivanje dinamičkih, odnosno termodinamičkih karakteristika sistema koristićemo metod dvovremenskih temperaturskih Grinovih funkcija [3,4,5]. Najpre je neophodno formulisati jednačine kretanja, koje su za ovaj sistem oblika:

$$\dot{u}_n = \frac{p_n}{M} \quad (2)$$

$$\dot{p}_n = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad (3)$$

Startujemo od Grinove funkcije:

$$F_{nm}(t) = \theta(t) \langle [u_n(t), u_m(0)] \rangle \equiv \langle \langle u_n(t) | u_m(0) \rangle \rangle \quad (4)$$

Ako ovu Grinovu funkciju diferenciramo po vremenu i iskoristimo jednačinu kretanja (2) dolazimo do sledećeg izraza:

$$\frac{d}{dt} F_{nm}(t) = \frac{I}{M} G_{nm}(t) \quad (5)$$

gde je:

$$G_{nm}(t) = \theta(t) \langle [p_n(t), u_m(0)] \rangle \equiv \langle \langle p_n(t) | u_m(0) \rangle \rangle \quad (6)$$

Ako sada izraz (6) diferenciramo po vremenu i iskoristimo jednačinu kretanja (3), dobijamo sledeću relaciju:

$$\frac{d}{dt} G_{nm}(t) = -i\hbar\delta(t)\delta_{nm} + C[F_{n+1,m}(t) + F_{n-1,m}(t) - 2F_{nm}(t)] \quad (7)$$

Neophodno je u jednačinama (5) i (7) izvršiti Furije transformacije tipa:

$$F_{nm}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{F}_{nm}(\omega) \quad (8)$$

$$G_{nm}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{G}_{nm}(\omega) \quad (9)$$

Pošto u računu figuriše i δ funkcija neophodno je napisati njenu integralnu reprezentaciju:

$$\delta(t) = \frac{I}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \quad (10)$$

Ove transformacije su bile neophodne da bi se došlo do izraza za funkcije $\tilde{F}_{nm}(\omega)$ i $\tilde{G}_{nm}(\omega)$. Diferencna jednačina za funkciju $\tilde{F}_{nm}(\omega)$ se dobija u obliku:

$$\tilde{F}_{n+1,m}(\omega) + \tilde{F}_{n-1,m}(\omega) + \left(\frac{M}{C} \omega^2 - 2 \right) \tilde{F}_{nm}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C} \delta_{nm} \quad (11)$$

Jednačinu (11) rešavamo primenom translatornog operatora ${}_n\hat{\tau}_l$ koji ima sledeće osobine:

$$\begin{aligned} {}_n \hat{\tau}_l f_{nm} &= f_{n+l,m} \\ {}_n \hat{\tau}_l^{-1} &= {}_n \hat{\tau}_{-l} \quad {}_n \hat{\tau}_l^k = {}_n \hat{\tau}_{kl} \end{aligned}$$

Ako uvedemo operator:

$${}_n \hat{T} = 2 - {}_n \hat{\tau}_1 - {}_n \hat{\tau}_{-1} \quad (12)$$

jednačina (11) dobija sledeći oblik:

$$\left(M \frac{\omega^2}{C} - {}_n \hat{T} \right) \tilde{F}_{nm}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C} \delta_{nm} \quad (13)$$

Ovde je neophodno istaći da operator na levoj strani jednačine (13) može biti napisan u dve ekvivalentne forme:

$$M \frac{\omega^2}{C} - {}_n \hat{T} = \frac{M\omega^2}{C} \left(I - \frac{C}{M\omega^2} {}_n \hat{T} \right) \quad (14)$$

$$M \frac{\omega^2}{C} - {}_n \hat{T} = - {}_n \hat{T} \left(I - \frac{M\omega^2}{C} {}_n \hat{T}^{-1} \right) \quad (15)$$

Iz ovoga slede i dve forme za inverzni operator:

$$\left(M \frac{\omega^2}{C} - {}_n \hat{T} \right)^{-1} = \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{C}{M\omega^2} {}_n \hat{T} \right)^v \frac{C}{M\omega^2} \quad (16)$$

$$\left(M \frac{\omega^2}{C} - {}_n \hat{T} \right)^{-1} = - \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{M\omega^2}{C} {}_n \hat{T}^{-1} \right)^v {}_n \hat{T}^{-1} \quad (17)$$

Korišćenjem inverznih operatora (16) i (17) dobijamo dva različita rešenja jednačine (13):

$$F_{nm}^{(1)}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{C}{M\omega^2} {}_n \hat{T} \right)^v \frac{C}{M\omega^2} \delta_{nm} \quad (18)$$

$$F_{nm}^{(2)}(\omega) = - \frac{i\hbar}{2\pi C} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{M\omega^2}{C} {}_n \hat{T}^{-1} \right)^v {}_n \hat{T}^{-1} \delta_{nm} \quad (19)$$

Izmedju ova dva rešenja postoji samo prividna razlika. Kronekerov simbol možemo predstaviti u obliku:

$$\delta_{nm} = \frac{I}{N} \sum_k e^{ik\lambda(n-m)} \quad (20)$$

gde je:

N - broj molekula u strukturi,

λ - konstanta idealne rešetke.

Lako se konstatuje da je:

$${}_n\hat{T}^v e^{ik\lambda n} = \left(4 \sin^2 \frac{k\lambda}{2} \right)^v e^{ik\lambda n} \quad (21)$$

Na osnovu izraza (21), uz prepostavku da je:

$$\frac{4C \sin^2 \frac{k\lambda}{2}}{M\omega^2} < I$$

može se zaključiti da na desnoj strani izraza (18) imamo konvergentnu geometrijsku progresiju, pa se ova jednačina svodi na:

$$F_{nm}^{(1)}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{M} \frac{I}{N} \sum_k \frac{I}{\omega^2 - \omega_k^2} e^{ik\lambda(n-m)} \quad (22)$$

gde je:

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \sin \frac{\lambda k}{2}$$

Rešenje jednačine (19) dobijećemo ako operator ${}_n\hat{T}$ predstavimo u obliku:

$${}_n\hat{T}^{-1} = \frac{I}{2} \sum_{v=0}^{\infty} \frac{I}{2^v} \left({}_n\hat{\tau}_I + {}_n\hat{\tau}_{-I} \right)^v$$

Pošto je $\left({}_n\hat{\tau}_I + {}_n\hat{\tau}_{-I} \right) e^{ikn\lambda} = e^{ikn\lambda} 2 \cos k\lambda$, sledi da je:

$${}_n\hat{T}^{-1} e^{ikn\lambda} = \frac{e^{ikn\lambda}}{4 \sin^2 \frac{k\lambda}{2}} \quad (23)$$

Ako se (23) uvrsti u (19) i predpostavi da je:

$$\frac{M\omega^2}{4 \sin^2 \frac{k\lambda}{2}} < I$$

tada progresija konvergira i dobija se jednačina (19) u obliku:

$$F_{nm}^{(2)}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{M} \frac{I}{N} \sum_k \frac{I}{\omega^2 - \omega_k^2} e^{ik\lambda(n-m)} \quad (24)$$

Kao što se vidi obe inverzne forme, (16) i (17), daju identične rezultate (22) i (24), pa će u daljim analizama biti korišćena ona forma sa kojom je proračun kraći. Da bi pronašli korelacionu funkciju koristićemo teoremu o spektralnoj intenzivnosti [6] za Grinovu funkciju F .

Dobijeni izraz za korelacionu funkciju je:

$$\begin{aligned} \langle u_m(0)u_n(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{\tilde{F}(\omega + i\delta) - \tilde{F}(\omega - i\delta)}{e^{\frac{\hbar\omega}{2\theta}} - 1} = \\ &= \frac{I}{N} \sum_k e^{ik\lambda(n-m)-i\omega_k t} \frac{\hbar}{2M\omega_k} cth \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} \end{aligned} \quad (25)$$

gde je $\theta = k_B T$ (k_B - Boltzmanova konstanta).

Dalji proračun uključuje pronalaženje Grinove funkcije:

$$D_{nm}(t) = \theta(t) \langle [p_n(t), p_m(0)] \rangle \equiv \langle \langle p_n(t) | p_m(0) \rangle \rangle \quad (26)$$

Ako se (26) diferencira po vremenu i iskoristi izraz za jednačinu kretanja (3) dolazi do relacije:

$$\frac{d}{dt} D_{nm}(t) = C [R_{n+1,m}(t) + R_{n-1,m}(t) - 2R_{nm}(t)] \quad (27)$$

gde je:

$$R_{nm}(t) = \theta(t) \langle [u_n(t), p_m(0)] \rangle \equiv \langle \langle u_n(t) | p_m(0) \rangle \rangle \quad (28)$$

Relaciju (28) takodje moramo diferencirati po vremenu uz korišćenje (2) što daje:

$$\frac{d}{dt} R_{nm}(t) = i\hbar\delta(t)\delta_{nm} + \frac{I}{M} D_{nm}(t) \quad (29)$$

Ako se izvrši Furije transformacija, jednačina za Furije likove funkcija D i R i posle njihove kombinacije dolazi se do jednačine:

$$\left(\frac{\omega^2}{C} M - \hat{T} \right) \tilde{D}_{nm}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \hbar M \hat{T} \delta_{nm} \quad (30)$$

Ako se primeni ranije opisani postupak proračuna dolazi se do rezultata:

$$\tilde{D}_{nm}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{I}{N} \sum_k e^{ik\lambda(n-m)} \frac{\hbar M \omega_k^2}{\omega^2 - \omega_k^2} \quad (31)$$

Iz relacije (31) sledi izraz za korelacionu funkciju:

$$\langle p_m(0) p_n(t) \rangle = \frac{I}{N} \sum_k e^{ik\lambda(n-m)-i\omega_k t} \frac{M\hbar\omega_k}{2} cth \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} \quad (32)$$

Na analogan način kako su dobijene korelacione funkcije (25) i (32) lako se mogu dobiti izrazi i za korelacione funkcije tipa $\langle u_{n+1}(0) u_n(0) \rangle$ i $\langle u_{n-1}(0) u_n(0) \rangle$, koje su potrebne za proračun fizičkih karakteristika posmatrane strukture.

2.2. FIZIČKE KARAKTERISTIKE

Pomoću korelacionih funkcija (25) i (32) i korelacionih funkcija za $\langle u_{n+1}(0) u_n(0) \rangle$ i $\langle u_{n-1}(0) u_n(0) \rangle$ izraz za unutrašnju energiju sistema na osnovu zadatog Hamiltonijana (1) traži se u obliku:

$$U = \langle \hat{H} \rangle = \sum_n \left\{ \frac{\langle p_n^2(0) \rangle}{2M} + C \left[\langle u_n(0) \rangle^2 - \frac{I}{2} \langle u_{n+1}(0)u_n(0) \rangle - \frac{I}{2} \langle u_{n-1}(0)u_n(0) \rangle \right] \right\} \quad (33)$$

Zamenom dobijenih korelacionih funkcija iz paragrafa 2.1. u (33) dobija se:

$$\begin{aligned} U &= \frac{I}{2N} \sum_{nk} \frac{I}{M} \frac{M\hbar\omega_k}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} + \frac{I}{2M} \sum_k \left\{ 2C \frac{\hbar}{2M\omega_k} - C(e^{-ik\lambda} + e^{ik\lambda}) \frac{\hbar}{2M\omega_k} \right\} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} \\ U &= \frac{I}{2N} \sum_{nk} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2} \left\{ \frac{\hbar\omega_k}{2} + 2C \frac{\hbar}{2M\omega_k} (1 - \cos k\lambda) \right\} = \\ &= \frac{I}{2} \sum_k \left\{ \frac{\hbar\omega_k}{2} + \frac{2\hbar C}{M\omega_k} \sin^2 \frac{\lambda k}{2} \right\} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} \end{aligned}$$

$$\text{Iz izraza } \omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{M}} \sin \frac{\lambda k}{2} \text{ sledi: } \sin^2 \frac{\lambda k}{2} = \frac{M\omega_k^2}{4C}$$

pa je dalje:

$$U = \frac{I}{2} \sum_k \left\{ \frac{\hbar\omega_k}{2} + \frac{2\hbar C}{M\omega_k} \frac{M\omega_k}{4C} \right\} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2\theta}$$

odnosno:

$$U = \frac{I}{2} \sum_k \hbar\omega_k \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_k}{2\theta} \quad (34)$$

Izvršićemo prelaz sa sume na integral po formuli:

$$\sum_k I \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\lambda}}^{\frac{\pi}{\lambda}} dk$$

i uzimajući da je $\hbar\omega_k \approx \hbar\nu k$, gde je $\nu = \lambda\sqrt{\frac{C}{M}}$ - brzina zvuka.

Izraz za unutrašnju energiju je posle toga sledećeg oblika:

$$U = \frac{I}{2} \frac{N\lambda}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{\lambda}}^{\frac{\pi}{\lambda}} dk \hbar\nu k \operatorname{cth} \frac{\hbar\nu k}{2\theta} \quad (35)$$

Ako uvedemo smenu: $x = \frac{\hbar\nu k}{2\theta}$ sledi da je: $\hbar\nu k dk = \frac{4\theta^2}{\hbar\nu} x dx$.

Granice integracije su: $x = \pm \frac{\hbar\nu \pi}{2\theta \lambda}$, pa se dobija sledeći izraz za unutrašnju energiju:

$$U = \frac{N\lambda}{4\pi} \frac{4\theta^2}{\hbar\nu} \int_{-\frac{\hbar\nu \pi}{2\lambda\theta}}^{\frac{\hbar\nu \pi}{2\lambda\theta}} x dx \operatorname{cth} x \quad (36)$$

Da bi dobili izraz za unutrašnju energiju na sobnim temperaturama, uvodimo aproksimacije: $\frac{\hbar v k}{2\theta} \ll I$ odnosno $x \approx 0$, $\operatorname{cth} x \approx \frac{1}{x} + \frac{1}{3}x$

Tada izraz (36) postaje:

$$U \approx \frac{N\lambda}{\pi\hbar\nu} \theta^2 \int_{-\frac{\hbar\nu}{2\lambda\theta}}^{\frac{\hbar\nu}{2\lambda\theta}} x dx \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{3}x \right)$$

Rešavanjem ovog integrala dobija se konačni izraz za unutrašnju energiju za oblast visokih temperatura $\left(\frac{E_k}{\theta} \ll I\right)$:

$$U = N \left\{ \theta + \frac{I}{36} \frac{\hbar^2 v^2 \pi^2}{\lambda^2} \frac{I}{\theta} \right\} \quad (37)$$

Za oblast niskih temperatura, granice integrala su približno beskonačne, pa se tada dobija unutrašnja energija u obliku:

$$U = N \frac{\pi\lambda}{12\hbar\nu} \theta^2 \quad (38)$$

Ako se u formuli (37) zadrži samo prvi član na desnoj strani, pa dobijeni izraz diferencira po temperaturi, dobija se izraz:

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = Nk_B \quad (39)$$

što predstavlja Dilon - Ptiov zakon za jednu dimenziju, odnosno specifičnu toplotu pri stalnoj zapremini.

Rezultate do kojih smo došli, možemo iskoristiti za izračunavanje i drugih fizičkih karakteristika jednodimenzionalne polimerne strukture.

Primer za to je koeficijent difuzije fononskog gasa u jednodimenzionalnoj strukturi, koji se uzima kao moduo srednje vrednosti

$$D = \left\langle \frac{p_n(\theta)}{M} u_n(\theta) \right\rangle$$

Lako se dobija:

$$D = \frac{\hbar}{2M} \quad (40)$$

Kao što se vidi koeficijent difuzije fononskog gasa idealne strukture ne zavisi od temperature, ali opada sa povećanjem mase [7].

Bitne fizičke karakteristike svakog sistema su entropija i slobodna energija.

Entropija se može dobiti koristeći izraz:

$$S = \frac{\langle \hat{H} \rangle - F}{\theta} = -\frac{\partial F}{\partial \theta}$$

Ovde je F slobodna energija koja se dobija u obliku:

$$F = \theta \sum_k \ln \left(1 - e^{-\frac{E_k}{\theta}} \right) \quad (41)$$

$$E_k = \hbar \omega_k = 2\hbar \sqrt{\frac{C}{M}} \sin \frac{\lambda k}{2}$$

Tražeći izvod slobodne energije po temperaturi dobija se izraz za entropiju:

$$S = \sum_k \left[\frac{E_k}{\theta} \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} - \ln \left(1 - e^{-\frac{E_k}{\theta}} \right) \right] \quad (42)$$

Za ove fizičke veličine takodje je moguće izračunati vrednosti na visokim i niskim temperaturama, ako se one prevedu u kontinuum. I slobodna energija i entropija [8] pokazuju istu zavisnost od temperature kao i unutrašnja energija (34)..

Koristeći poznati izraz:

$$U = F - \theta S$$

lako je zaključiti da se izvedeni zaključci o ponašanju unutrašnje energije odnose i na slobodnu energiju i entropiju.

Poznavanje ovih fizičkih karakteristika daje mogućnost opisivanja jednodimenzionalne strukture sa ravnomernom raspodelom masa. Dobijeni rezultati su očekivani, što opravdava primenu ovog metoda na strukture sa ravnomernom raspodelom masa i opravdava takodje primenu na strukture sa neravnomernom raspodelom masa.

3. STRUKTURE SA NERAVNOMERNOM RASPODELOM MASA

Za analizu efekata neravnomerne raspodele masa iskoristićemo formalizam translatornih operatora koji je demonstriran na idealnoj jednodimenzionalnoj rešetki sa ravnomernom raspodelom masa. Pokazano je u prethodnom poglavlju da se metod translatornih operatora može uspešno primeniti prilikom analize Grinovih funkcija struktura sa ravnomernom raspodelom masa. Do istih rezultata bi se došlo primenom i drugih metoda teorijske analize na ove strukture. Naš cilj je bio da demonstriramo mogućnost baš ovog formalizma, na analizu jednodimenzionalne rešetke sa ravnomernom raspodelom masa, radi njegove primene na strukture sa neravnomernom raspodelom masa.

U slučaju neravnomerne raspodele masa primena metoda translatornih operatora je neophodna jer samo ona daje algoritam po kome se Grinove funkcije mogu računati sa velikom tačnošću.

3.1. METOD ANALIZE

U strukturama sa neravnomernom raspodelom masa uzima se da $M \rightarrow M_n$. Kako mase zavise od indeksa čvora, Hamiltonian koji opisuje ovu strukturu je oblika:

$$H = \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2M_n} + \frac{C}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right] \quad (43)$$

Ovde je predpostavljeno da su konstante elastičnosti jednake za sve susedne atome.

Kao i u prethodnoj glavi ispitivaćemo najpre Grinove funkcije tipa pomeraj - pomeraj, Γ i funkcije tipa impuls - impuls, L .

S obzirom na rezultate iz prethodne glave, koji su dati u jednačinama (13), (30) i (23), mogu se odmah pisati jednačine koje se odnose na strukture sa neravnomernom raspodelom masa:

$$\left(\hat{M}_n \frac{\omega^2}{C} - {}_n\hat{T} \right) \Gamma_{nm}(\omega) = \frac{i\hbar}{2\pi C} \delta_{nm} \quad (44)$$

$$\left(\frac{\omega^2}{C} \hat{M}_n - {}_n\hat{T} \right) L_{nm}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \hbar \hat{M}_n \hat{T} \delta_{nm} \quad (45)$$

Kao što se vidi u ovim formulama, masa zavisi od indeksa čvora, pa se mora tretirati kao multiplikativni operator, \hat{M}_n . Takođe je očigledno da operatori ${}_n\hat{T}$ i \hat{M}_n ne komutiraju, pa je o ovome neophodno voditi računa u daljoj proceduri proračuna.

Operator $\left(\frac{\omega^2}{C} \hat{M}_n - {}_n\hat{T} \right)$ kao i u slučaju ravnomerne raspodele masa ima svoj

inverzni operator koji je dat u dve različite forme. Za potrebe našeg proračuna koristićemo samo jednu od njih i to onu koja je analogna formi (16). U prethodnoj glavi je pokazano da obe forme i (16) i (17) daju isti rezultat pa je to razlog što ovde koristimo samo jednu od mogućih formi.

Za naš slučaj se dobija:

$$\left(\frac{\omega^2}{C} \hat{M}_n - {}_n\hat{T} \right)^{-1} = \frac{C}{\omega^2} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{C}{\omega^2} \right)^v \left(\hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \right)^v \hat{M}_n^{-1} \quad (46)$$

Zbog nekomutativnosti operatora ${}_n\hat{T}$ i \hat{M}_n važi sledeća relacija:

$$\left(\hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \right)^v = \hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \dots \hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \quad (47)$$

v - puta

Na osnovu (41) i (43) može se pisati:

$$\Gamma_{nm}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{\omega^2} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{C}{\omega^2} \right)^v \left(\hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \right)^v \hat{M}_n^{-1} \delta_{nm} \quad (48)$$

Na osnovu (44) i (46) dobija se:

$$L_{nm}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar C}{\omega^2} \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{C}{\omega^2} \right)^v \left(\hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \right)^v \hat{T} \delta_{nm} \quad (49)$$

Beskonačni redovi koji figurišu u jednačinama (48) i (49) ne mogu se prosumirati kao kod struktura sa ravnomernom raspodelom masa, pa je zbog toga jedino moguće funkcije Γ i L računati aproksimativno. Za naš dalji proračun dovoljno je uzeti razvoj do trećeg člana. U toj aproksimaciji jednačine (48) i (49) dobijaju sledeće oblike:

$$\begin{aligned}\Gamma_{nm}(\omega) \approx & \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{M_n \omega^2} \left\{ \delta_{nm} + \frac{C}{\omega^2} \left(\frac{2}{M_n} \delta_{nm} - \frac{I}{M_{n+1}} \delta_{n+1,m} - \frac{I}{M_{n-1}} \delta_{n-1,m} \right) + \right. \\ & + \frac{C^2}{\omega^4} \left[\left(\frac{4}{M_n^2} + \frac{I}{M_n M_{n+1}} + \frac{I}{M_n M_{n-1}} \right) \delta_{nm} - 2 \left(\frac{I}{M_n M_{n+1}} + \frac{I}{M_{n+1}^2} \right) \delta_{n+1,m} - \right. \\ & \left. \left. - 2 \left(\frac{I}{M_n M_{n-1}} + \frac{I}{M_{n-1}^2} \right) \delta_{n-1,m} + \frac{\delta_{n+2,m}}{M_{n+1} M_{n+2}} + \frac{\delta_{n-2,m}}{M_{n-1} M_{n-2}} \right] \right\} \quad (50)\end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned}L_{nm}(\omega) \approx & \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar C}{\omega^2} \left\{ 2\delta_{nm} - \delta_{n+1,m} - \delta_{n-1,m} + \right. \\ & + \frac{C}{\omega^2 M_n} (6\delta_{nm} - 4\delta_{n+1,m} - 4\delta_{n-1,m} + \delta_{n+2,m} + \delta_{n-2,m}) + \\ & + \frac{C^2}{\omega^4 M_n} \left[\left(\frac{12}{M_n} + \frac{4}{M_{n+1}} + \frac{4}{M_{n-1}} \right) \delta_{nm} - \left(\frac{8}{M_n} + \frac{6}{M_{n+1}} + \frac{I}{M_{n-1}} \right) \delta_{n+1,m} - \right. \\ & - \left(\frac{8}{M_n} + \frac{6}{M_{n-1}} + \frac{I}{M_{n+1}} \right) \delta_{n-1,m} + \left(\frac{2}{M_n} + \frac{4}{M_{n+1}} \right) \delta_{n+2,m} + \\ & \left. \left. + \left(\frac{2}{M_n} + \frac{4}{M_{n-1}} \right) \delta_{n-2,m} - \frac{\delta_{n+3,m}}{M_{n+1}} - \frac{\delta_{n-3,m}}{M_{n-1}} \right] \right\} \quad (51)\end{aligned}$$

Takodje se mora uzeti u obzir i činjenica da je kristal beskonačan.

3.2. UNUTRAŠNJA ENERGIJA STRUKTURE

S obzirom na izraz za Hamiltonijan (43), unutrašnja energija strukture sa neravnomernom raspodelom masa je oblika:

$$\begin{aligned}U = \langle \hat{H} \rangle = & \frac{I}{2} \sum_n \frac{I}{M_n} \langle p_n(\theta) p_n(\theta) \rangle + \frac{I}{2} \left[\sum 2C \langle u_n(\theta) u_n(\theta) \rangle - \right. \\ & \left. - C \left(\langle u_{n+1}(\theta) u_n(\theta) \rangle + \langle u_{n-1}(\theta) u_n(\theta) \rangle \right) \right] \quad (52)\end{aligned}$$

Formule (50) i (51) biće iskorišćene za određivanje srednjih vrednosti u formuli za unutrašnju energiju. Da bi se našle srednje vrednosti na istom čvoru, u (50) i (51) treba uzeti da je $n = m$. Tada iz (50) sledi:

$$\begin{aligned}\Gamma_{nn}(\omega) &= \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{M_n \omega^2} \left\{ I + \frac{2C}{\omega^2 M_n} + \frac{C^2}{\omega^4 M_n} \left(\frac{4}{M_n} + \frac{I}{M_{n+1}} + \frac{I}{M_{n-1}} \right) \right\} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar}{M_n} \frac{\omega^2}{\omega^4 - 2\alpha_l \omega^2 - \beta_l^2}\end{aligned}\quad (53)$$

gde je:

$$\alpha_l = \frac{C}{M_n} \quad ; \quad \beta_l^2 = \frac{C^2}{M_n} \left(\frac{I}{M_{n+1}} + \frac{I}{M_{n-1}} \right)$$

Na isti način iz formule (51) sledi:

$$L_{nn}(\omega) = \frac{i}{2\pi} 2\hbar C \frac{\omega^2}{\omega^4 - 2\alpha_2 \omega^2 - \beta_2^2} \quad (55)$$

gde je:

$$\alpha_2 = \frac{3C}{2M_n} \quad ; \quad \beta_2^2 = \frac{C^2}{M_n} \left(\frac{2}{M_{n+1}} + \frac{2}{M_{n-1}} - \frac{3}{M_n} \right)$$

i

$$\frac{2}{M_{n+1}} + \frac{2}{M_{n-1}} - \frac{3}{M_n} > 0 \quad (56)$$

Koristeći teoremu o spektralnoj intenzivnosti iz formula (53) i (55) se dobijaju korelace funkcije:

$$\langle u_n(\theta) u_n(\theta) \rangle = \frac{\hbar}{4M_n \sqrt{\alpha_l^2 + \beta_l^2}} \left\{ \Phi_{ln} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{ln}}{2\theta} + \Phi_{2n} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2n}}{2\theta} \right\} \quad (57)$$

gde je:

$$\Phi_{ln} = \sqrt{\sqrt{\alpha_l^2 + \beta_l^2} + \alpha_l} \quad ; \quad \Phi_{2n} = \sqrt{\sqrt{\alpha_l^2 + \beta_l^2} - \alpha_l} \quad (58)$$

i

$$\langle p_n(\theta) p_n(\theta) \rangle = \frac{\hbar C}{2 \sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2}} \left\{ \Phi_{ls} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{ls}}{2\theta} + \Phi_{2s} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2s}}{2\theta} \right\} \quad (59)$$

gde je:

$$\Phi_{ls} = \sqrt{\sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2} + \alpha_2} \quad ; \quad \Phi_{2s} = \sqrt{\sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2} - \alpha_2} \quad (60)$$

Za izračunavanje srednje vrednosti izraza $\langle u_{n+1}(\theta) u_n(\theta) \rangle$, koji takodje figuriše u formuli za unutrašnju energiju, da bi se postigao isti stepen tačnosti kao i u prethodnim formulama, u (48) se mora uzeti i četvrti član na desnoj strani. Tada dobijamo:

$$\Gamma_{n,n+1}(\omega) = -\frac{i}{2\pi} \frac{\hbar C}{M_n M_{n+1}} \frac{I}{\omega^4 - 2\alpha_3 \omega^2 - \beta_3^2} \quad (61)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= C \left(\frac{I}{M_n} + \frac{I}{M_{n+1}} \right) \quad ; \quad \beta_3^2 = C^2 \left(\frac{3}{M_n M_{n+1}} - \frac{I}{M_n M_{n-1}} - \frac{I}{M_{n+1} M_{n+2}} \right) \\ \frac{3}{M_n M_{n+1}} &> \frac{I}{M_n M_{n-1}} - \frac{I}{M_{n+1} M_{n+2}} \end{aligned} \quad (62)$$

Na osnovu ovoga sledi:

$$\langle u_{n+1}(0) u_n(0) \rangle = -\frac{\hbar C}{4\sqrt{\alpha_3^2 + \beta_3^2}} \frac{I}{M_n M_{n+1}} \left\{ \frac{I}{A_{ln}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{ln}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2n}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2n}}{2\theta} \right\} \quad (63)$$

gde je:

$$A_{ln} = \sqrt{\sqrt{\alpha_3^2 + \beta_3^2} + \alpha_3} \quad ; \quad A_{2n} = \sqrt{\sqrt{\alpha_3^2 + \beta_3^2} - \alpha_3} \quad (64)$$

Srednja vrednost izraza $\langle u_{n-1}(0) u_n(0) \rangle$ dobija se na sličan način kao i formula (63) i iznosi:

$$\langle u_{n-1}(0) u_n(0) \rangle = -\frac{\hbar C}{4\sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2}} \frac{I}{M_n M_{n-1}} \left\{ \frac{I}{A_{ls}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{ls}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2s}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2s}}{2\theta} \right\}$$

gde je:

$$A_{ls} = \sqrt{\sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2} + \alpha_4} \quad ; \quad A_{2s} = \sqrt{\sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2} - \alpha_4} \quad (65)$$

Zamenom (57), (59), (64) i (65) u (52) dobija se unutrašnja energija jednodimenzionalnog lanca sa neravnomernom raspodelom masa:

$$\begin{aligned} U &= \sum_n \left[\frac{I}{2M_n} \frac{\hbar}{2\sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2}} \left\{ \Phi_{ls} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{ls}}{2\theta} + \Phi_{2s} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2s}}{2\theta} \right\} + \right. \\ &\quad + \frac{C\hbar}{4M_n \sqrt{\alpha_1^2 + \beta_1^2}} \left\{ \Phi_{ln} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{ln}}{2\theta} + \Phi_{2n} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2n}}{2\theta} \right\} + \\ &\quad + \frac{C}{2} \frac{\hbar C}{4\sqrt{\alpha_3^2 + \beta_3^2}} \frac{I}{M_n M_{n+1}} \left\{ \frac{I}{A_{ln}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{ln}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2n}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2n}}{2\theta} \right\} - \\ &\quad \left. - \frac{\hbar C^2}{4\sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2}} \frac{I}{M_n M_{n-1}} \left\{ \frac{I}{A_{ls}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{ls}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2s}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2s}}{2\theta} \right\} \right] \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned}
U = & \sum_n \frac{\hbar C}{4M_n} \left[\frac{I}{\sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2}} \left\{ \Phi_{1s} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{1s}}{2\theta} + \Phi_{2s} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2s}}{2\theta} \right\} + \right. \\
& + \frac{I}{\sqrt{\alpha_1^2 + \beta_1^2}} \left\{ \Phi_{1n} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Phi_{1n}}{2\theta} + \Phi_{2n} \operatorname{ctg} \frac{\hbar \Phi_{2n}}{2\theta} \right\} + \\
& + \frac{C}{2\sqrt{\alpha_3^2 + \beta_3^2}} \frac{I}{M_{n+1}} \left\{ \frac{I}{A_{1n}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{1n}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2n}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2n}}{2\theta} \right\} + \\
& \left. + \frac{C}{\sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2}} \frac{I}{M_{n-1}} \left\{ \frac{I}{A_{1s}} \operatorname{cth} \frac{\hbar A_{1s}}{2\theta} - \frac{I}{A_{2s}} \operatorname{ctg} \frac{\hbar A_{2s}}{2\theta} \right\} \right]
\end{aligned}$$

Ovde je očigledno da unutrašnja energija sadrži periodične funkcije sa različitim periodima oscilovanja. Ovo navodi na zaključak da neravnomerna raspodela masa, uslovljava kvaziperiodično ponašanje unutrašnje energije, ako se unutrašnja energija posmatra kao funkcija temperature.

Kvaziperiodično ponašanje unutrašnje energije je posledica disipativnih procesa u strukturi, jer su neki polovi Grinovih funkcija čisto imaginarni. Zapaža se da se u izrazu za unutrašnju energiju pojavljuju singulariteti za one vrednosti θ gde su argumenti trigonometrijskih kotangensnih hiperbolnih funkcija jednaki celobrojnom umnošku π .

Kako je izraz za unutrašnju energiju struktura sa neravnomernom raspodelom masa izračunat aproksimativno, nije očigledno da se singulariteti mogu anulirati. Međutim, moguće je predpostaviti takvu raspodelu masa kojom bi se singulariteti anulirali u aproksimativnom izrazu. Takva raspodela masa predstavljava bi uslov termodinamičke stabilnosti sistema u upotrebljenoj aproksimaciji.

Isti zaključci bi se mogli izvesti i za entropiju ovakve strukture, koristeći izraze iz prethodnog poglavlja. Znači, moguće je govoriti i o kvaziperiodičnom ponašanju entropije kao funkcije temperature.

ZAKLJUČAK

U ovom radu su analizirani disipativni efekti u strukturama sa neravnomernom raspodelom masa. Analiza je izvršena primenom metoda Grinovih dvovremenskih temperaturskih funkcija i metodom translacionih operatora. Iako je tokom proračuna korišćen niz aproksimacija, dobijene vrednosti za unutrašnju energiju koje predstavljaju samo približne vrednosti, pokazale su opravdanost upotrebe metoda translatornih operatora. Ovaj metod je bio najpre testiran na jednodimenzionalnim strukturama sa ravnomernom raspodelom masa.

Pokazano je da neravnomerna raspodela masa može dovesti do disipacije oscilatorne energije, usled čega unutrašnja energija, pa samim tim i entropija ovih struktura predstavljaju kvaziperiodične funkcije temperature.

Kao što je poznato disipativnost i kvaziperiodičnost entropije su tipične osobine biomaterije [9,10] pa bi izloženi prilaz i rezultati koji iz njega slede mogli da nadju primenu u biofizičkim analizama.

LITERATURA

- [1] B.S. Tošić, Lj.D. Mašković, U.F. Kozmidis-Luburić, V. Jovović, G. Davidović; *Physica A.*, 216, (1995) 478-488
- [2] V. Jovović, G. Davidović, B.S. Tošić, Lj.D. Mašković, U.F. Kozmidis-Luburić, D. Ćirić; *Physica A.*, 223, (1996) 263-279
- [3] N.N. Bogolyubov; *Izabrannye trudy*, (Naukova Dumka, Kiev, 1971)
- [4] S.V. Tyablikov; *Metodi kvantovoje teorii magnetizma*, (Nauka, Moskva, 1965)
- [5] D.N. Zubarev; *Neravnovesnaja statističeskaja termodinamika*, (Nauka, Moskva, 1971)
- [6] B.S. Tošić; *Statistička fizika*, (Novi Sad, 1978)
- [7] B.M. Agranović i M.A. Galanin; *Perenos energii elektronogo vozbuždenija u kondenzirovanih sredah*, (Nauka, Moskva, 1978)
- [8] B. Tošić, S. Pilipović; *Physica A*, 216, (1995) 333-352
- [9] M. Eigen; *Molekularnaja samoorganizacija i rani stadii evoluciji*, UFN T109 (1973) 545
- [10] I. Prigogine, J. Nicolis; *Biologičeski porjadok struktura i neustoičivost*, UFN T109 (1973) 517

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATI^KI FAKULTET
KLJU^NA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:
RBR
 - Identifikacioni broj:
IBR
 - Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*
TD
 - Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal TZ*
 - Vrsta rada: *Diplomski rad*
VR
 - Autor: *Jasmina Mrkić, br. dos. 208/88*
AU
 - Mentor: *Dr Ljiljana Mašković, vanr.prof. PMF Novi Sad*
MN
 - Naslov rada: *Disipativni efekti u polimernim strukturama sa neravnomernom raspodelom masa*
NR
 - Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*
JP
 - Jezik izvoda: *Srpski*
JL
 - Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*
ZP
 - Uže geografsko područje: *Vojvodina*
UGP
 - Godina: *1998.*
GO
 - Izdavač: *Autorski reprint*
IZ
 - Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
MA
 - Fizički opis rada: *(3/20/10/0/0/0/0)*
FO
 - Naučna oblast: *Fizika*
NO
 - Naučna disciplina: *Fizika polimera*
ND
 - Predmetna odrednica/klju^ne reči:
Polimerne strukture, disipativnost, raspodela masa.
- **PO**
 - Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF Novi Sad*
^U
 - Važna napomena: *Nema VN*
 - Izvod: *U radu je primenjen metod Gri-novih funkcija i formalizam translator-nog operatora za izračunavanje unutrašnje energije i entropije u polimernim strukturama sa neravnomernom ras-podelom masa. Pokazano je da neravnomerna raspodela masa dovodi do disipacije oscilatorne energije, usled čega unutrašnja energija, pa samim tim i entropija ovih struktura predstavljaju kvaziperiodične funkcije temperature.*
IZ
 - Datum prihvatanja teme od strane Veća: *24.06.1998..*
DP
 - Datum odbrane: *13.11.1998.*
DO
 - Članovi komisije:
Predsednik:
Dr Bratislav Tošić, redovni profesor, PMF, Novi Sad
Članovi:
Dr Ljiljana Mašković, vanr. profesor, PMF, Novi Sad, mentor
Dr Darko Kapor, red.prof., PMF, Novi Sad
KO