УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНОМАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ

ДИПЛОМСКИ РАД

РАСПОДЕЛА МАСА У ХЕТЕРОГЕНИМ СИСТЕМИМА НА ВИСОКИМ И НИСКИМ ТЕМПЕРАТУРАМА

Миланка Мандић

Нови Сад, 1998.

Користим прилику да се захвалим свим онима који су ми на неки начин помогли да урадим овај рад.

Посебну захвалност дугујем свом ментору Др. Љ.Машковић, ванредном професору П.М.Ф.- а у Новом Саду, чија је несебична помоћ била од изузетног значаја за завршавање овог рада.

Захваљујем се Др. М.Шкрињар, редовном професору П.М.Ф.- а у Новом Саду, на саветима и сугестијама датим током израде овог рада.

Такође се захваљујем Др. Б.С. Тошићу , редовном професору П.М.Ф.- а у Новом Саду на критичкој анализи резултата овог рада.

Дугујем захвалност и члановима уже породице на стрпљењу и указаном поверењу.

Нови Сад, 1998. *Миланка Мандић*

САДРЖАЈ

I ГЛАВА

УВОД

Полимери као и многи композитни материјали и смеше сачињени су од молекула различитих маса и представљају хетерогене системе. Због тога расподела маса битно одређује готово све физичке карактеристике оваквих структура.

Предмет анализе овог рада је расподела маса на високим и ниским температурама. У радовима / 1,2,3/ дат је модел расподеле маса који је на задовољавајући начин описивао понашање полимерних материјала на високим температурама. Овај модел биће искоришћен да се одреди средња вредност масе хетерогених система у зависности од температуре.

Модел за одређивање расподеле масе на ниским температурама биће формулисан у овом раду. Као модел посматраног система биће узет линеарни осцилатор, при чему ће бити усвојено схватање да су на апсолутној нули елонгације једнаке нули, па се може сматрати да је у близини апсолутне нуле кинетичка енергија доминантна. Израз за средњу вредност масе у овом моделу биће одређен апроксимативно уз коришћење трапезног правила и Симпсоновог правила. И у случају ниских температура тражићемо зависност средњих маса од температура.

Рад се састоји из пет делова.

Први део је увод, док ће у другом делу бити дат кратак опис хетерогених система.

Трећи део обухвата расподелу маса на високим температурама и тумачи понашања маса у зависности од температуре.

Четврти део се односи на расподелу маса на ниским температурама и показује како се маса мења са порастом температура.

У закључку ће бити дате коначне вредности маса и извршено поређење резултата за опсег ниских и високих температура.

II ГЛАВА

ХЕТЕРОГЕНИ СИСТЕМИ

Хетерогене системе чине структуре састављене од молекула различитих маса.То су различите смеше, као и читав низ полимерних и композитних материјала.

Полимерни материјали / 3 / спадају у групу структура које се могу састојати од различитих полимера, а ови од великог броја молекула. Молекули могу бити различитих маса, па је за њихову анализу потребно посебно формулисати метод анализе.

У хетерогене структуре спадају и композитни материјали који су добијени комбиновањем два материјала у чврстом стању. Композитни материјали могу бити:

- метал- метал
- метал- керамика
- метал- полимер
- керамика- керамика
- полимер- полимер
- полимер- керамика,

зависно од механичких, температурских и других особина.

Јасно је да хетерогене структуре нису транслаторно инваријантне. Као што је познато, највећи број полимера није транслаторно инваријантан и има специфичну расподелу маса. Како је предмет овог рада хетерогени систем у чврстом стању, било би логично искористити стандардне и добро развијене методе анализе физичких карактеристика из теорије кристала (који поседују транслаторну инваријантност). Управо ова чињеница да хетерогени системи немају транслаторну инваријантност, доводи до потребе увођења неког новог метода теоријске анализе. Потребно је наћи такав метод анализе који може да пружи макар квалитативну слику понашања физичких карактеристика оваквих структура. У ту сврху чињен је низ покушаја / 4,5,6 /.

Квалитативна анализа оваквих структура могућа је ако се формулише статистички метод, који за дате услове даје највероватнију расподелу маса.

Тада се за све физичке карактеристике у зависности од масе могу наћи њихове средње вредности. На основу познавања скупа ових вредности може се добити задовољавајући опис физичког понашања хетерогених структура.

Уовом приступу хетерогени систем представља смешу од N молекула. Укупна маса смеше је μ . Масе молекула су међусобно различите, али сесвака од њих може представити као целобројан умножак неке елементарне масе- m_0. Очигледно је да је m_0 блиско атомској јединици масе и износи $m_0 = 1{,}67 \times 10^{-27}$ kg.

На основу овога молекулске масе M_ν се могу представити као:

$$M_\nu = \nu\ m_0 \qquad \nu = 1,2,3,\ldots\nu_{max} \qquad (2.1)$$

Горња граница индекса ν (ν_{max}) одређује се на основу граничне претпоставке да цела посматрана структура представља један једини огромни молекул масе μ.

Одавде следи да је :

$$\nu_{max} = \frac{\mu}{m_0} > N \qquad (2.2)$$

Број молекула са масом M_ν биће означен са N_ν.

С обзиром на ово, могуће је написати једначину:

$$\sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} N_\nu \cdot M_\nu = \mu \qquad (2.3)$$

која представља услов одржавања масе.

Такође је очигледно да се може написати и релација:

$$\sum_{\nu=1}^{\nu_{max}} N_\nu = N \qquad (2.4)$$

која представља услов одржавања укупног броја молекула.

При овоме се подразумева да се укупна осцилаторна енергија хетерогеног система одржава.

Подесно је увести и такву масу M_0, која се N пута садржи у укупној маси хетерогене структуре:

$$M_0 = \frac{\mu}{N} \qquad (2.5)$$

Из добијеног израза се види да M_0 на известан начин представља аритметичку средину извесних маса које су заступљене у хетерогеној смеши. То значи да ако би се проблем расподеле маса разматрао чисто стохастички, а то значи без увођења било каквих карактеристика система у рачун, онда би највероватнија маса управо била једнака маси M_0, која представља количник укупне масе система и броја молекула у систему. Овај стохастички резултат одговара ономе што срећемо у природи, а то је, да је највећи број природних система образован од молекула једнаких маса. Увођење динамичких параметара у систем добија се сасвим другачија слика.

Наведени приступ, послужиће као модел за формулацију статистичког метода који ће дати вероватноћу расподеле маса како на високим тако и на ниским температурама.

I I I ГЛАВА

РАСПОДЕЛА МАСА НА ВИСОКИМ ТЕМПЕРАТУРАМА

Хетерогена структура представља чврсту супстанцу која не поседује особину транслаторне инваријантности. Сваки од молекула чврсте супстанце има свој равнотежни положај који је добио на рачун неке уложене енергије:

$$\theta_c = k_B T_c$$

где је T_c -температура очвршћавања, а k_B-Болцманова константа. Ова енергија га је уврстила у том положају. Молекул осцилује око свог равнотежног положаја, и као такав представља линеарни осцилатор.

Како се, као што је већ наглашено систем неможе анализирати методама транслаторне инваријантних структура, овде ће бити уведена статистичка анализа овог система.

Пре него што се пређе на статистичку анализу потребно је дефинисати моделну енергију тог молекула. Пошто молекул осцилује његова осцилаторна енергија је:

$$E_{osc} = M_\nu \frac{\dot{u}_\nu^2 + \Omega_\nu^2 u_\nu^2}{2} , \tag{3.1}$$

где је u_ν -молекулски померај, а Ω -фреквенција ν-тог осцилатора.

У оквиру предложеног модела потребно је величину:

$$\frac{\dot{u}_\nu^2 + \Omega_\nu^2 u_\nu^2}{2} ,$$

заменити са квадратом брзине стварања супстанце, која се са статистичке тачке гледишта може представити као однос укупне енергије утрошене за стварање чврсте супстанце:

$$Q_c = N \theta_c \tag{3.2}$$

и укупне масе супстанце:

$$\mu = N\, M_s \tag{3.3}$$

То значи да је:

$$\frac{\dot{u}_v^2 + \Omega_v^2 u_v^2}{2} \rightarrow \frac{Q_c}{\mu} = \frac{\theta_c}{M_s} \tag{3.4}$$

Сматрајући да молекул масе M_V може да заузме на различитим температурама такве нивое енергије који представљају целобројни умножак величине: $(M_v\ /\ M_s)\theta_c$, за моделну енергију осцилатора добијамо израз:

$$E_{osc} \rightarrow E_{vk} = M_v \cdot (\theta_c / M_s) \cdot k \qquad k = 0,1,2,3,\ldots \tag{3.5}$$

Број молекула који поседују енергију E_{vk} биће означен са n_{vk}. Пошто број молекула масе M_v износи N_v, очигледно је да важи закон одржања укупног броја молекула:

$$\sum_k n_{vk} = N_v \tag{3.6}$$

Укупна унутрашња енергија подсистема који сачињавају молекули масе M_v биће означена са:

$$U_v = \sum_k E_{vk}\, n_{vk} \tag{3.7}$$

Расподелу маса за описани систем хетерогене структуре тражићемо методама статистичке физике, аналогно Болцмановој статистици, а то значи да треба формулисати статистичку вероватноћу / 7,8 / система молекула који представља број микростања којима са реализује описано макростање.

Користећи Стирлингову формулу статистичка вероватноћа подсистема молекула масе M_v се може написати као:

$$P_\nu = \frac{N_\nu!}{\prod_k n_{\nu k}!} \approx \frac{N_\nu^{N_\nu}}{\prod_k n_{\nu k}^{n_{\nu k}}} \tag{3.8}$$

С обзиром на услове одржања (3.6) и (3.7) треба формирати функционал:

$$\phi_\nu = \ln P_\nu - \alpha N_\nu - \gamma u_\nu = N_\nu \ln N_\nu - \sum_k (n_{\nu k} \ln n_{\nu k} + \alpha n_{\nu k} + \gamma E_{\nu k} n_{\nu k}) \tag{3.9}$$

где су α и γ неодређени Ланґражеови множитељи.

Највероватнију расподелу молекула добијамо варирањем функционала.

Функционал се варира по n_ν и варијација се изједначава са нулом. Тако се добија да је:

$$n_{\nu k} = e^{-(\alpha+1)} e^{-\gamma E_{\nu k}} \tag{3.10}$$

Ако се (3.10) уврсти у (3.6) добија се израз за вероватноћу:

$$W_{\nu k} = \frac{n_{\nu k}}{N_\nu} = [\,1 - e^{-\gamma \theta_c M_\nu / M_s}\,]\; e^{-\gamma \theta_c (M_\nu / M_s) k} \tag{3.11}$$

Ланґражеов множитељ γ представља реципрочну вредност температуре:

$$\gamma = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{k_B T} \tag{3.12}$$

Ако се (3.12) уврсти у (3.11) добија се израз који карактерише вероватноћу да молекул масе M_ν на температури θ има енергију $E_{\nu K}$:

$$W_{\nu k} = \frac{n_{\nu k}}{N_\nu} = [\,1 - e^{-(\theta_c/\theta)(M_\nu/M_s)}\,]\; e^{-(\theta_c/\theta)(M_\nu/M_s) k} \tag{3.13}$$

Ако се употреби континуална апроксимација, тј. изврши прелазак на континуалне варијабле по шеми:

$$\begin{aligned} \frac{M_v}{M_s} &\rightarrow \frac{M}{M_v} \equiv y, && \ldots y \in [\,0,\infty\,) \\ \kappa &\rightarrow x, && \ldots x \in [\,0,\infty\,) \\ W_{vk} &\rightarrow W(y,x) && \end{aligned} \tag{3.14}$$

добија се следећи израз за вероватноћу у континуалној апроксимацији:

$$W(y,x) = \left\{ 1 - e^{-(\theta_c/\theta)y} \right\} e^{-(\theta_c/\theta)xy} \tag{3.15}$$

Како је предмет овог рада расподела маса на високим температурама искористићемо високотемпературску апроксимацију:

$$\frac{\theta_c}{\theta} << 1 \tag{3.16}$$

Израз за вероватноћу (3.15) у високотемпературској апроксимацији добија следећи облик:

$$W(y,x) = \frac{\theta_c}{\theta}\, y\, e^{-(\theta_c/\theta)xy} \tag{3.17}$$

Променљива x може се одредити из услова:

$$\int_0^{\infty} W(x,y)\, dy = 1 \tag{3.18}$$

и износи:

$$x = \sqrt{\frac{\theta}{\theta_c}} = \sqrt{\frac{T}{T_c}} \tag{3.19}$$

Заменом (3.19) у израз за вероватноћу (3.17) добија се коначан облик расподела маса на високим температурама:

$$W(y) = \frac{T_c}{T}\, y\, e^{-y\sqrt{(T_c/T)}}, \qquad y = \frac{M}{M_s} \tag{3.20}$$

Из израза за вероватноћу види се да вероватноћа расподела маса опада са порастом температуре у домену високих температура.

Нађена вероватноћа расподела маса хетерогеног система послужиће за израчунавање средње вредности масе овог система.

Она се добија као очекивана вредност варијабле M по вероватноћама W:

$$M_s = \int_0^{\infty} M\, W(y)\, dy = M \int_0^{\infty} y\, W(y)\, dy; \quad M = \mu/N \tag{3.21}$$

Када се на основу (3.20) израчуна интеграл добија се:

$$M_s = 2M \sqrt{\frac{T}{T_c}} \tag{3.22}$$

Добијени резултат показује да средња вредност масе расте са порастом температуре по закону $T^{1/2}$.

Добијени резултат за средњу масу указује на чињеницу да при високим температурама значајну улогу у процесима транспорта преузимају молекули већих маса.

Овај резултат може имати велики практични значај.

Израз за расподелу маса може бити искоришћен за одређивање оних физичких карактеристика хетерогених система које зависе од молекулских маса. Примери таквих карактеристика дати су у раду / 1 / (брзина звука, коефицијент дифузије, коефицијент топлотне проводљивости) и показано је њихово добро слагање са експерименталним резултатима / 9,10,11 /. Ова чињеница квалификује уведени статистички модел за добар метод анализе физичких карактеристика хетерогених система.

IV ГЛАВА

РАСПОДЕЛА МАСА НА НИСКИМ ТЕМПЕРАТУРАМА

Модел који је био коришћен за одређивање средње вредности масе на високим температурама у предходној глави, није могуће користити у домену ниских температура, јер је овај модел прављен за температуре више од Дебајевских температура. Као што је познато, ове температуре се крећу око T_D=150K, и оне су ниске у односу на собне температуре.

Модел који треба да опише понашање хетерогеног система на ниским температурама биће формулисан у односу на Дебајевске температуре. То значи да је домен температура овог модела $T \ll T_D$.

Стога се уводи моделна слободна енергија система везаних осцилатора, која представља средњу вредност стварне енергије по Дебајевској сфери.

Та моделна енергија је:

$$E_{mod} = \hbar v \bar{k} \tag{4.1}$$

где је v - брзина звука, а $\bar{k}$ - средња вредност таласног вектора.

$$\bar{k} = \frac{\int d^3\bar{k}\, k}{\int d^3\bar{k}} = \frac{\int_0^{k_D} dk\, k^3}{\int_0^{k_D} dk\, k^2} = \frac{3}{4} k_D \tag{4.2}$$

где је k_D - Дебајевски таласни вектор.

Као што је познато брзина звука се може изразити у форми:

$$v = a\sqrt{\frac{C_H}{M}} = \frac{a\sqrt{C_H}}{\sqrt{M}} \tag{4.3}$$

где је a - константа решетке, C_H - Хукова константа еластичности, а

M - маса осцилатора.

Заменом (4.2) и (4.3) у (4.1) добија се:

$$E_{mod} = \hbar a \frac{\sqrt{C_H}}{\sqrt{M}} \frac{3}{4} k_D \tag{4.4}$$

како је k_D a ~ π, добија се коначан израз за модалну енергију:

$$E_{mod} = \frac{C}{\sqrt{M}}, \qquad C = \frac{3}{4} \hbar\pi\sqrt{C_H} \tag{4.5}$$

Битно је истаћи да овакав избор модалне енергије показује да енергија опада са квадратним кореном из масе осцилатора, па ћемо због тога за систем са хетерогеном масом увести израз за енергију:

$$\varepsilon_i = \frac{C}{\sqrt{M_i}} \tag{4.6}$$

Овде је M_i - једна од маса која улази у састав хетерогеног система. Да би одредили средњу вредност масе на ниским температурама, потребно је најпре израчунати вероватноћу расподеле маса хетерогеног система.

Посматрамо скуп M молекула различитих маса од којих N_i молекула има масу M_i .

Статистичка вероватноћа овог система, као и у претходној глави, дата је са:

$$P = \frac{N!}{N_1!N_2! \dots N_i! \dots N_n!} \approx \frac{N^N}{\prod\limits_{i=1} N_i^{N_i}} \tag{4.7}$$

Закони одржања броја честица и енергије су:

$$N = \sum_i N_i = \text{const.} \tag{4.8}$$

$$U = \sum_i N_i \, \varepsilon_i = \text{const.} \tag{4.9}$$

Највероватнију расподелу маса добићемо ако формулишемо функционал:

$$\phi = \ln P - \alpha N - \beta U = N\ln N - \sum_i (N_i \ln N_i + \alpha N_i + \beta \varepsilon_i N_i) \qquad (4.10)$$

где су: α и β неодређени Лагранжеови множитељи. Варијација функционала ϕ је :

$$\delta\phi = - \sum_i (1 + \ln N_i + \alpha + \beta\varepsilon_i)\delta N_i \qquad (4.11)$$

Ако се (4.11) изједначи са нулом добија се :

$$\ln N_i = -(\alpha+1) - \beta\varepsilon_i$$

односно:

$$N_i = e^{-(\alpha+1)} e^{-\beta\varepsilon_i} \qquad (4.12)$$

Фактор $e^{-(\alpha+1)}$ могуће је одредити из услова (4.8):

$$e^{-(\alpha+1)} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}} \qquad (4.13)$$

што даје :

$$N_i = \frac{N e^{-\beta\varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{k_B T} \qquad (4.14)$$

где је $\varepsilon_i = C / \sqrt{M_i}$ моделна енергија за овакав систем маса.

Одавде је вероватноћа да молекул масе M_i има енергију ε_i дата са:

$$W_i = \frac{N_i}{N} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}} \qquad (4.15)$$

С обзиром на добијену вредност за ε_i основне формуле (4.14) и (4.15) гласе:

$$N_i = \frac{N\, e^{-\beta C/\sqrt{M_i}}}{\sum_i e^{-\beta C/\sqrt{M_i}}} \tag{4.16}$$

$$W_i = \frac{e^{-\beta C/\sqrt{M_i}}}{\sum_i e^{-\beta C/\sqrt{M_i}}} \tag{4.17}$$

Пошто ћемо у даљим рачунима вероватноћу користити по континуалној апроксимацији, сматраћемо да се масе мењају од минималне вредности M_o до максималне вредности M_M. Сумирање по i се при прелазу на континум своди на интеграцију по маси.

Тада је (4.16):

$$N(\theta) = \frac{N\, e^{-C/\theta\sqrt{M}}}{\int_{M_o}^{M_M} dM\, e^{-C/\theta\sqrt{M}}} \tag{4.18}$$

док је (4.17):

$$W_i(\theta) = \frac{e^{-C/\theta\sqrt{M_i}}}{\int_{M_o}^{M_M} dM\, e^{-C/\theta\sqrt{M_i}}} \tag{4.19}$$

Интеграли у (4.18) и (4.19) су непогодни за рачун, јер $e^{-(C/\theta)(1/\sqrt{M_i})}$ нема примитивну функцију, па ћемо зато користити погоднији начин израчунавања. Прорачун се може извршити и нумеричким путем, али ако желимо да добијемо аналитички трактабилне резултате функцију $1/\sqrt{M_i}$ у формулама (4.18) и (4.19) треба апроксимирати са линеарном функцијом (трапезно правило) или са квадратном функцијом (Симпсоново правило).

Захтеваћемо да крива ($b-aM_i$) има исте вредности као $1/\sqrt{M_i}$ у тачкама M_o и M_M. Тада је:

$$\frac{1}{\sqrt{M_i}} = b\text{-}aM_i \quad , \quad M_i \in (M_{oi}, M_{Mi}) \tag{4.20}$$

$$b\text{-}aM_M = \frac{1}{\sqrt{M_M}} \tag{4.21}$$

$$b\text{-}aM_o = \frac{1}{\sqrt{M_o}} \tag{4.22}$$

где важи да је $M_M >> M_o$.

Из (4.21) и (4.22) добија се:

$$a = \frac{\begin{vmatrix} 1/\sqrt{M_M} & 1 \\ 1/\sqrt{M_o} & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} M_M & 1 \\ M_o & 1 \end{vmatrix}} = \frac{\sqrt{M_M}\text{-}\sqrt{M_o}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)\text{-}1]} \quad \frac{1}{M_o} \tag{4.23}$$

$$b = \frac{\begin{vmatrix} M_M & 1/\sqrt{M_M} \\ M_o & 1/\sqrt{M_o} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} M_M & 1 \\ M_o & 1 \end{vmatrix}} = \frac{M_M^{3/2} - M_o^{3/2}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)\text{-}1]} \quad \frac{1}{M_o} \tag{4.24}$$

Користећи крајње тачке интервала M_o и M_M долазимо до апроксимације:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{M_i}} &= \frac{M_M^{3/2} - M_o^{3/2}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)\text{-}1]} \quad \frac{1}{M_o} \; - \\ &- \frac{M_M^{1/2} - M_o^{1/2}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)\text{-}1]} \quad \frac{M_i}{M_o} \end{aligned} \tag{4.25}$$

Формуле (4.18) и (4.19) у трапезној апроксимацији гласе:

$$N(\theta) = \frac{N\, e^{-bC/\theta} \; e^{aCM/\theta}}{\int_{M_o}^{M_M} dM\, e^{-bC/\theta} \; e^{-aCM/\theta}}$$

тј.

$$N(\theta) = \frac{N\, e^{aCM/\theta}}{\int_{M_o}^{M_M} dM\, e^{aCM/\theta}} \tag{4.26}$$

$$W(0) = \frac{e^{aCM/0}}{\int_{M_o}^{M_M} dM\, e^{aCM/\theta}} \tag{4.27}$$

Погодније је користити израз за вероватноћу хетерогеног система у следећем облику:

$$W_i(\theta) = \frac{e^{\beta E_o x_i}}{\sum_i e^{\beta E_o x_i}} \tag{4.28}$$

овде је E_o - енергија основног стања осцилатора која износи:

$$E_o = C\, \frac{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_o}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)-1]} = \frac{3}{4}\, \pi\hbar\sqrt{C_H}\, \frac{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_o}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)-1]} \tag{4.29}$$

док је:

$$x_i = \frac{M_i}{M_o} \quad , \quad x \in (1\, ;\, \frac{M_M}{M_o}) \tag{4.30}$$

У континуалној апроксимацији вероватноћа је:

$$W_i(x) = \frac{e^{\beta E_o x_i}}{\int_1^{M_M/M_o} dx_i\, e^{\beta E_o x_i}} \tag{4.31}$$

Користићемо формулу за вероватноћу (4.31) да би израчунали средњу вредност масе на ниским температурама коју карактерише низ физичких особина хетерогеног система.

Средња вредност масе у континуалној апроксимацији се одређује као:

$$\overline{M} = \frac{M_o^2 \int_1^{M_M/M_o} dx\, x\, e^{E_o x/\theta}}{M_o \int_1^{M_M/M_o} dx\, e^{E_o x/\theta}} \tag{4.32}$$

Вредности интеграла у имениоцу и бројиоцу су:

$$\int_1^{M_M/M_o} dx\, x\, e^{E_o x/\theta} = \frac{\theta}{E_o}\, x\, e^{E_o x/\theta}\Big|_1^{M_M/M_o} - \left(\frac{\theta}{E_o}\right)^2 e^{E_o x/\theta}\Big|_1^{M_M/M_o} =$$

$$= \frac{\theta}{E_o}\, e^{E_o/\theta}\left[e^{M_M/M_o}\left(\frac{M_M}{M_o} - \frac{\theta}{E_o}\right) - \left(1 - \frac{\theta}{E_o}\right)\right] \tag{4.33}$$

$$\int_1^{M_M/M_o} dx\, e^{E_o x/\theta} = \frac{\theta}{E_o}\, e^{E_o x/\theta}\Big|_1^{M_M/M_o} = \frac{\theta}{E_o}\, e^{E_o/\theta}\left(e^{M_M/M_o} - 1\right) \tag{4.34}$$

Ако се (4.33) и (4.34) замене у (4.32) добија се:

$$\overline{M} = \frac{M_o\left[e^{M_M/M_o}\left(\frac{M_M}{M_o} - \frac{\theta}{E_o}\right) - \left(1 - \frac{\theta}{E_o}\right)\right]}{e^{M_M/M_o} - 1} \tag{4.35}$$

Ако се (4.29) уврсти у (4.35) добија се средња вредност масе у облику:

$$\overline{M} = \frac{M_M\, e^{M_M/M_o}}{e^{M_M/M_o} - 1}\left[1 - \frac{\theta}{C}\, \frac{M_o}{M_M}\, \frac{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)-1]}{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_o}}\right] -$$

$$- \frac{M_o}{e^{M_M/M_o} - 1}\left[1 - \frac{\theta}{C}\, \frac{\sqrt{M_M}\sqrt{M_o}[(M_M/M_o)-1]}{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_o}}\right] \tag{4.36}$$

У апроксимацији $M_м >> M_o$ израз за средњу масу је:

$$\overline{M} = \overline{M}(\theta) = M_м \left(1 - \frac{\theta}{C} \sqrt{M_o}\right) \tag{4.37}$$

Као што се види из (4.37) на ниским температурама средња маса опада са порастом температуре. Границе важења формуле (4.37) одредићемо из услова:

$$\overline{M}(\theta_м) = M_м \tag{4.38 a}$$

$$\overline{M}(\theta_o) = M_o \tag{4.38 b}$$

Из првог услова (4.38 a) следи да је на T = 0 K највероватнија највећа маса, што је потпуно разумљиво, јер молекули на овој температури имају најмању кинетичку енергију, а она је најмања када је маса највећа.

Други услов (4.38 b) одређује граничну температуру до које се може користити наведени модел. Он се своди на:

$$\theta_0 \equiv \theta_{гранично} = \frac{C}{\sqrt{M_0}} \tag{4.39}$$

Експериментални резултати / 12,13,14 / показују да је домен ниских температура хетерогених структура какве су полимерне, композитне и друге, иде до 100 K. На основу овога и релације (4.39) долазимо до закључка да параметар модела Ω треба да буде реда 5×10^6 Hz, што би значило фреквенцију осцилатора на екстремно ниским температурама. Поређења ради, напоменимо да је $\theta_D \sim 10^{13}$ Hz (θ_D- Дебајевска температура), што одговара највишим температурама.

При коришћењу Симпсоновог правила предпоставља се да је:

$$\frac{1}{\sqrt{M}} = \alpha M^2 + \beta M + \gamma \tag{4.40}$$

Коефицијенти α, β, γ одређују се у тачкама M_0, $M_м$ и $S = (M_0+M_м)/2$:

$$\alpha M_o^2 + \beta M_o + \gamma = 1/\sqrt{M_o} \quad \rightarrow \quad \gamma = 1/\sqrt{M_o} - \alpha M_o^2 - \beta M_o$$
$$\alpha S^2 + \beta S + \gamma = 1/S$$

$$\underline{\alpha M_M^{\,2} + \beta M_M + \gamma = 1/\sqrt{M_M}}$$

$$\alpha(S^2-M_0^{\,2}) + \beta(S-M_0) = \frac{M_0-S}{\sqrt{M_0}S}$$

$$\alpha(M_M^{\,2}-M_0^{\,2}) + \beta(M_M-M_0) = \frac{\sqrt{M_0}-\sqrt{M_M}}{\sqrt{M_0}\sqrt{M_M}}$$

$$D = \begin{vmatrix} S^2-M_0^{\,2} & S-M_0 \\ M_M^{\,2}-M_0^{\,2} & M_M-M_0 \end{vmatrix} = (S-M_0)(\,S+M_0)(M_M-M_0) -$$

$$- (M_M-M_0)(M_M+M_0)(S-M_0) = (S-M_0)(M_M-M_0)(S+M_0) - (M_M-M_0) =$$
$$= - (M_M-S)(M_M-M_0)(S-M_0)$$

$$D_\alpha = \begin{vmatrix} \dfrac{M_0-S}{S\sqrt{M_0}} & S-M_0 \\ \dfrac{\sqrt{M_0} - \sqrt{M_M}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_0}} & M_M-M_0 \end{vmatrix} =$$

$$= - \frac{(M_M-M_0)(S-M_0)}{S\sqrt{M_0}} + \frac{(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})(S-M_0)}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_0}} =$$

$$D_\alpha = - \frac{(S-M_0)}{\sqrt{M_0}} \left[- \frac{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_0}}{\sqrt{M_M}} + \frac{M_M - M_0}{S}\right]$$

$$\alpha = \frac{D_\alpha}{D} = \frac{\dfrac{-(S-M_0)}{\sqrt{M_0}}\left[\dfrac{(M_M-M_0)}{S} - \dfrac{\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0}}{\sqrt{M_M}}\right]}{-(M_M-S)(S-M_0)(M_M-M_0)}$$

$$\alpha = \frac{\dfrac{1}{S}\ (M_M - M_0) - \dfrac{1}{\sqrt{M_M}}\ (\sqrt{M_M} - \sqrt{M_0})}{\sqrt{M_0}(M_M - S)(M_M - M_0)}$$

$$D_\beta = \begin{vmatrix} S^2-M_0^2 & \dfrac{M_0-S}{S\sqrt{M_0}} \\ M_M^2-M_0^2 & \dfrac{\sqrt{M_0}-\sqrt{M_M}}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_0}} \end{vmatrix} =$$

$$= - \frac{(S-M_0)(S+M_0)(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})}{\sqrt{M_M}\sqrt{M_0}} + \frac{(M_M-M_0)(M_M+M_0)(S-M_0)}{S\sqrt{M_0}} =$$

$$D_\beta = \frac{(S-M_0)}{\sqrt{M_0}} \left[- \frac{(S-M_0)(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})}{\sqrt{M_M}} + \frac{M_M^2-M_0^2}{S}\right]$$

$$\beta = \frac{D_\beta}{D} = - \frac{\dfrac{M_M^2-M_0^2}{S} - \dfrac{(S+M_0)(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})}{\sqrt{M_M}}}{\sqrt{M_0}\,(M_M-S)(M_M-M_0)}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{M_0}} - M_0^2\alpha - \beta M_0 =$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{M_0}} - M_0^2 \frac{\dfrac{1}{S}(M_M-M_0) - \dfrac{1}{\sqrt{M_M}}(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})}{\sqrt{M_0}(M_M-S)(M_M-M_0)} +$$

$$+ \frac{M_0 \left(\dfrac{M_M^2-M_0^2}{S} - \dfrac{(S+M_0)(\sqrt{M_M}-\sqrt{M_0})}{\sqrt{M_M}}\right)}{\sqrt{M_0}(M_M-S)(M_M-M_0)}$$

Види се да је :

$\alpha>0$, $\beta<0$ и $\gamma>o$,

па се може писати :

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \approx AM^2\text{-}BM + C$$

Апроксимативне формуле за $M_0 << M_M$ и $S \approx M_M / 2$ су:

$$A= \frac{2}{M_M{}^2\sqrt{M_0}}$$

$$B = \frac{3}{M_M\sqrt{M_0}}$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{M_0}}$$

Претпостављајући да је $M_0 << M_M$, дошли смо до формуле :

$$\frac{1}{\sqrt{M}} \approx \frac{2}{M_M{}^2\sqrt{M_0}} M^2 - \frac{3}{M_M\sqrt{M_0}} M + \frac{1}{\sqrt{M_0}} \qquad (4.41)$$

Добијена парабола је негативна у интервалу $M \in (M_M/2, M_M)$ и као таква, лоше апроксимира свуда позитивну функцију $1/\sqrt{M}$.

Због тога смо се задржали на трапезној апроксимацији: (4.29). Истини за вољу, треба истаћи да би се мењањем положаја тачке S, можда добила парабола која боље апроксимира криву $1/\sqrt{M}$ него (4.41), али такви покушаји су овде изостављени.

V ГЛАВА

ЗАКЉУЧАК

Циљ овог рада је био да се нађе расподела маса у структурама са хетерогеним масама, која на задовољавајући начин описује понашање полимерних, композитних и других сличних материјала као и смеша на високим и ниским температурама.

Вероватноћа расподеле маса на високим температурама опада са порастом температура, а добијени резултат за средњу вредност масе показује да маса расте са порастом температуре по закону $T^{1/2}$.

На ниским температурама добија се израз за средњу вредност масе који показује да маса опада са порастом температуре. На температури T = 0 K највероватнија је највећа маса, што је логично, јер молекули на овој температури имају најмању кинетичку енергију.

На основу познавања средњих вредности маса на високим и ниским температурама може се добити задовољавајући опис свих физичких карактеристика хетерогених система, који зависе од масе / 13,14 /.

Ови теоријски резултати показују добро слагање са експериментом.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Јововић, Г. Давидовић, Б.С. Тошић, Љ.Д. Машковић, У. Козмидис- Лубурић, Д. Ћирић: " Physica A", 223 (1996)

2. Љ. Машковић, Д. Мијатовић: "Science – Security – Police", 2,(1997)

3. Љ. Машковић, П. Максимовић, В. Јововић:"Полимерни материјали", 1997, Београд

4. Л.Р. Линдау,"Э Х ЕТФ", Т7, 18, 1937

5. Stanley H.E." Introduction to Phase Transitions on Critical Phenomena" Oxford University Press, Лондон, 1972

6. Љ. Машковић, Ж. Шкрбић, СФИН, IX(1), 71-78, 1996

7. Ђ. Мушицки:"Увод у Теоријску физику 1", 226-230, Београд, 1964

8. Л.Д. Ланрау, Е.М. Лифшиц:"Статистичка физика", Мир, Москва, 1964

9. C. Tsitsilianis:"Polimer Communications " 30, 331, 33, 1989

10. В.М. Агранович, М.Д. Галанин:"Пренос енергии електроного возбуждения в конденсированых средах", Наука, Москва, 1978

11. V. Eru, A. Suna, J.Tomkiemitz, P.Arakian,R.P. Groff:" Phys. Rev." B5, 3222, 1972

12. B. Poulaert at. All " Polymer Communications", 31, 148-151, 1990

13. Dale S. Pearson at, "Macromolecules" 1994, 27, 771- 719

14. Ziming Zhon at, "Macromolecules", 1994, 27, 7402- 7405

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

- Редни број:
  РБР
- Идентификациони број:
  ИБР
- Тип документације: *Монографска документација*
  ТД
- Тип записа: *Текстуални штампани материјал*
  ТЗ
- Врста рада: *Дипломски рад*
  ВР
- Аутор: *Миланка Мандић Будурина, бр. дос. 152/81*
  АУ
- Ментор: *Др Љиљана Машковић ван. проф. ПМФ Нови Сад*
  МН
- Наслов рада: *Расподела маса у хетерогеним системима на високим и ниским температурама*
  НР
- Језик публикације: *Српски (ћирилица)*
  ЈП
- Језик извода: *Српски*
  ЈИ
- Земља публиковања: *Југославија*
  ЗП
- Уже географско подручје: *Војводина*
  УГП
- Година: *1998.*
  ГО
- Издавач: *Ауторски репринт*
  ИЗ
- Место и адреса: *Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 4, 21000 Нови Сад*
  МА
- Физички опис рада: *(5/24/68/0/0/0/0)*
  ФО
- Научна област: *Физика*
  НО
- Научна дисциплина: *Статистичка физика*
  НД
- Предметна одредница/кључне речи: *Хетерогени системи, расподела масе, температура*
  ПО
- Чува се: *Библиотека Института за физику, ПМФ Нови Сад*
  ЧУ
- Важна напомена: *Нема*
  ВН
- Извод: *У раду су дати модели за статистички прорачун расподеле маса хетерогених система на високим и ниским температурама. На основу те анализе закључено је да средња вредност масе на високим температурама расте са порастом температуре док на ниским температурама опада са порастом температуре.*
  ИЗ
- Датум прихватања теме од стране Већа:
  30.04.1998.
  ДП
- Датум одбране: 28.05.1998
  ДО
- Чланови комисије:
  Председник:
  Др. Братислав Тошић, редовни професор, ПМФ Нови Сад

  Чланови:
  Др. Марио Шкрињар, редовни професор, ПМФ, Нови Сад
  Др. Љиљана Машковић, ван. проф. ПМФ, Нови Сад
  КО