

тин. Збільшення  $[K^+]_{out}$  від 5 мМ до 100 мМ викликало немонотонний зсув залежностей струму від напруги. Залежності деяких параметрів функціонування калієвого каналу (наприклад, сталої часу активації) від зовнішньої концентрації іонів калію мали нелінійні залежності з максимумами або мінімумами. Аналіз експериментальних результатів виявив, що отримані ефекти немонотонних залежностей зумовлені “деформацією” зачиненого стану воротної частинки та відповідними енергетичними зрушеннями і зумовлені іон-конформаційною взаємодією. Розвинуто адекватну теоретичну модель, що кількісно описує експериментальні дані та дає їм фізичну інтерпретацію.

## АГРЕГАЦІЯ ДИПОЛЬНИХ ЧАСТИНОК В РАМКАХ МОДЕЛІ ЕДЕНА

*Д. Горюнов (НаУКМА),*

*Я. Іваненко, В. Манк (Інститут біологічної хімії НАНУ)*

Вивчення явища агрегації частинок з постійним або індукованим дипольним моментом є важливим у зв'язку з явищем колоїдної агрегації, процесами структуроутворення в електро- та магнітореологічних рідинах [1,2]. Дана робота присвячена комп'ютерному моделюванню агрегації частинок з постійними або індукованими дипольними моментами в рамках моделі Едена.

У випадку частинок з постійними дипольними моментами [1] потенціал диполь-дипольної взаємодії має вигляд

$$U_{ij} = (-3(\mu_i r_{ij})(\mu_j r_{ij}) - r^2 (\mu_i \mu_j)) / r^5, \quad (1)$$

де  $\mu_i, \mu_j$  — дипольні моменти частинок, що знаходяться у вузлах ґратки  $i$  та  $j$ ,  $r_{ij}$  — радіус-вектор, що з'єднує ці вузли,  $r = |r_{ij}|$ . Враховуючи однаковість величин дипольних моментів  $|\mu_i| = \mu$  і діаметру частинок  $d = 1$ , потенціал взаємодії можна записати у вигляді

$$U_{ij} = (-3 \cos\theta_i \cos\theta_j - \cos\theta_{ij}) / r^3, \quad (2)$$

де  $\theta_i, \theta_j$  — кути між напрямками диполів  $\mu_i, \mu_j$  та радіус-вектором  $r_{ij}$ ,  $\theta_{ij}$  — кут між напрямками диполів  $\mu_i, \mu_j$ . Введемо безрозмірний параметр  $\beta$ , що дається виразом

$$\beta = \mu^2 / kT, \quad (3)$$

де  $T$  — температура.

Модель полягає в наступній послідовності кроків:

- 1) в центрі ґратки розміщується початковий диполь (далі — кластер), з певною орієнтацією  $\mu_j$ ;
- 2) випадковим чином вибирається точка  $j$  периметра кластера, в якій розміщується диполь з випадковою орієнтацією  $\mu_j$ ;
- 3) розраховується сумарна енергія диполь-дипольної взаємодії диполя  $\mu_j$  з диполями кластера

$$U_j = \sum_{i=1}^N U_{ij}, \quad (4)$$

де  $i = 1, 2, \dots, N$  — частинки кластера;

- 4) розраховується ймовірність  $p$ , з якою  $\mu_j$  приєднується до кластера, за формулою

$$p = \exp(-\beta(U_j + U_{min})), \quad (5)$$

де  $U_{min} = -5$ . (Такий вибір  $U_{min}$  продиктований розглядом основного стану системи диполів на квадратній ґратці.);

- 5) при  $p > q$ , де  $q$  — випадкове число з інтервалу  $[0, 1]$ , диполь  $\mu_j$  приєднується до кластера в точці  $j$ , причому його орієнтація залишається незмінною; при  $p < q$  вибирається нова точка периметру, і кроки 2, 3, 4, 5 повторюються.

У випадку частинок з індукованим дипольним моментом у зовнішньому полі [2], всі дипольні моменти будуть однаковими,  $\mu_j = \mu$  і співнаправленими з зовнішнім полем  $E$

$$\mu = \alpha E, \quad (6)$$

де  $\alpha$  — поляризація частинок. Енергія взаємодії двох таких диполів, розташованих на відстані один від одного, буде дорівнювати

$$U = \mu^2 \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3}, \quad (7)$$

де  $\theta$  — кут між напрямком поля  $E$  і вектором  $r$ , що з'єднує центри частинок.

Моделювання проходить за такою схемою:

- 1) задається напрямок поля  $E$  та значення температурного параметра  $\beta$  (3);
- 2) в центрі ґратки розміщується перша частинка;
- 3) на периметрі зростаючого кластера випадковим чином вибирається точка  $j$ , в якій розміщується пробна частинка;
- 4) безрозмірна енергія взаємодії частинки в точці  $j$  з частинками  $i$ , що утворюють агрегат, розраховується за формулою (згідно з (7))

$$U_{ij} = \sum_i \frac{1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}}{r_{ij}^3}; \quad (8)$$

5) розраховується значення ймовірності приєднання частинки до кластера за формулою

$$p = \exp(-\beta(U_{ij} + U_{min})), \quad (9)$$

де  $U_{min} = -4$ , що приблизно відповідає мінімальному значенню енергії взаємодії між одиничним диполем і його найближчими сусідами на квадратній ґратці в процесі росту;

б) пробна частинка в точці стає частиною кластера з ймовірністю  $p$ .

В залежності від параметру  $\beta$ , в моделі агрегації частинок з постійним дипольним моментом спостерігається утворення кластерів різної просторової структури (ізотропних та анізотропних) та з різним рівнем упорядкованості диполів, що має тенденцію до суперантиферромагнітного (САФ) типу упорядкування при низьких температурах згідно з поведінкою системи диполів на простій квадратній ґратці в рівновазі. Ріст кластерів характеризується утворенням доменів з різними напрямками осей САФ упорядкування. В моделі агрегації частинок з індукованими дипольними моментами в зовнішньому полі спостерігається утворення ізотропних компактних кластерів при високій температурі й анізотропних компактних кластерів, витягнутих у напрямку зовнішнього поля при низькій температурі, причому, чим нижче температура, тим сильніше проявляється анізотропія кластера в напрямку поля.

### Література:

1. *P. Mors, R. Botet, R. Julien.* "Cluster-cluster aggregation with dipolar interactions" // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 20 (1987), L975-L980;
2. *S. Fraden, A. J. Hurd, R. B. Meyer.* "Electric-field-induced association of colloidal particles" // *Phys. Rev. Lett.*, 63, 21, 1989, 2373—2376.

## МОРФОЛОГІЯ І ФРАКТАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ КЛАСТЕРІВ ПРИ ВРАХУВАННІ РІЗНИХ ТИПІВ МІЖЧАСТИНКОВИХ ВЗАЄМОДІЙ

*М. Лебовка* (кафедра фіз.-мат. наук НаУКМА),  
*М. Вигорницький, Я. Іваненко, Н. Санченко*  
(Інститут біологічної хімії НАНУ)

В процесах росту бактеріальних колоній, дендритоутворення, електропробою, розтріскування, протікання рідин через пористі середовища часто виникають складні нерівноважні структури, які можуть проявляти фрактальні властивості. Найбільш важливою тут