

ЛИТЕРАТУРА

1. Арнольд В. И., Варченко А. Н., Гусейн-заде С. М. Особенности дифференцируемых отображений. Изд. Наука, М., 1982.
2. Гилмор П. Прикладная теория катастроф. Изд. Мир, М., 1984, т. 2.
3. Pearcey T. *Phil. Mag.*, 37, 311 (1946).
4. Кравцов Ю. А., Орлов Ю. И. В сб. «Современные проблемы распространения волн», ИРЭАН, 1979.
5. Кравцов Ю. А., Орлов Ю. И. УФН, 132, 475 (1980).
6. Kravtsov Yu. A., Orlov Yu. I. *Rad. Sci.*, 16, 975 (1981).
7. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. Изд. Наука, М., 1973.
8. Токатлы В. И., Кинбер Б. Е. Изв. вузов. Радиофизика, 14, 761 (1976).
9. Газазян Э. Д., Кинбер Б. Е. Изв. вузов. Радиофизика, 14, 1219 (1971).
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. Изд. Наука, М., 1967.

ՊԱՐԱԲՈԼԱՅԻՆ ՀԱՅԵԼՈՒ ԿԻՉԱԿԵՏԻ ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Է. Դ. ԳԱԶԱԶՅԱՆ, Ա. Ա. ԱՍԱՏՐՅԱՆ

Քննարկված է պարաբոլային հայելու կիզակետի կայունությունը հայելու մակերևույթի փոքր դեֆորմացիաների և ընկնող ալիքի ուղղության նկատմամբ: Ցույց է տրված, որ հայելու մակերևույթի փոքր դեֆորմացիաների դեպքում կիզակետը տրոհվում է երկու մոտիկ կառուցիկական «կտուցների», իսկ առանցքայինից տարբեր ուղղությամբ ընկնող հարթ ալիքի դեպքում վեր է ածվում պարզ կառուցիկ ճյուղի: Որոշված են կիզակետի գոյության պայմանները:

ON THE STABILITY OF PARABOLOIDAL REFLECTOR FOCUS

E. D. GAZAZIAN, A. A. ASATRYAN

The stability of paraboloidal reflector focus is studied in two different cases: a) when the surface of the reflector has some small deformation, and b) when a plane wave falls on the reflector at a small angle to the axis.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 22, вып. 6, 331—335 (1987)

УДК 541.251

РАСЧЕТ КОНФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛ *n*-МЕТОКСИБЕНЗИЛИДЕН-*n'*-*n*-БУТИЛАНИЛИНА И *n*-ЭТОКСИБЕНЗИЛИДЕН-*n'*-*n*-БУТИЛАНИЛИНА

А. Ц. САРКИСЯН, С. М. ЯЙЛОЯН, Х. В. КОТАНДЖЯН

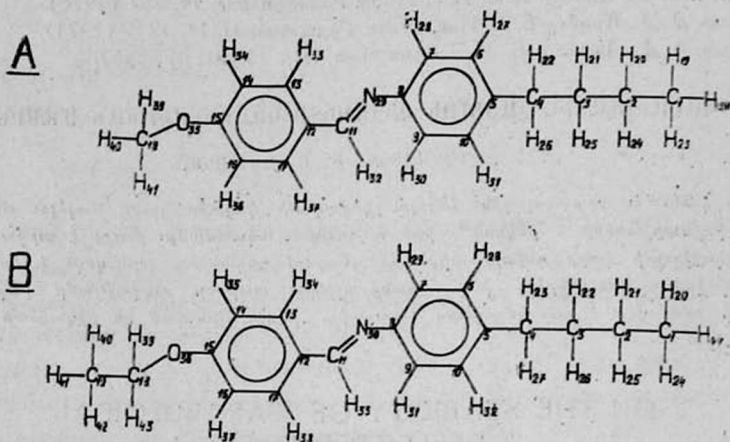
Институт прикладных проблем физики АН АрмССР

(Поступила в редакцию 10 мая 1986 г.)

Проведен расчет конформации молекул *n*-метоксibenзилиден-*n'*-*n*-бутиланилина и *n*-этоксibenзилиден-*n'*-*n*-бутиланилина. Показано, что двугранный угол между плоскостями двух ароматических колец этих молекул составляет соответственно 84° и 86°. Валентные углы при атомах азота и кислорода сильно деформированы. Плоскость углеродов бутильной группы составляет 80° с плоскостью анилинового кольца.

Геометрическая структура молекул жидких кристаллов является важной характеристикой таких параметров как температурная область существования мезофазы, степень упорядоченности, коэффициент плотной упаковки и др.

Настоящая работа посвящена расчету конформации молекул нематических жидких кристаллов *p*-метоксибензилиден-*p*'-*n*-бутиланилина (МББА) и *p*-этоксibenзилиден-*p*'-*n*-бутиланилина (ЭББА). Структурные формулы этих веществ приведены на рисунке, где нумерация атомов проведена в форме, удобной для расчетов на ЭВМ. Расчеты проводились методом атом-атом потенциалов [1, 2].



Структурные формулы: А) МББА, В) ЭББА.

Так как в рассматриваемых молекулах ароматические кольца не перегружены, в дальнейших расчетах будем считать их правильными шестиугольниками. Согласно методу потенциалов атом-атом энергия взаимодействия U_1 валентно-несвязанных атомов определяется выражением

$$U_1 = \sum_{k,s} f_m(r_{ks}), \quad (1)$$

$$f_m(r_{ks}) = -A(r_0/r_{ks})^6 + B \exp(-\rho r_{ks}/r_0), \quad (2)$$

где r_{ks} — расстояние между валентно-несвязанными *K*- и *S*-атомами, r_0 — равновесное расстояние, A , B и ρ — параметры потенциальной кривой (индекс m обозначает род потенциала $C \cdots C$, $C \cdots H$, $H \cdots N$ и т. д.).

Энергия деформации валентных углов разна

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_i C_i (\Delta \alpha_i)^2, \quad (3)$$

где $\Delta \alpha_i$ — отклонение валентного угла α_i от идеального значения, C_i — упругие постоянные.

Для расчета на ЭВМ потенциальную кривую (2) удобно представить в виде [2]

$$f(r) = M r^{-6} + N \exp(-qr). \quad (4)$$

Параметры M , N , q для потенциалов $C \cdots C$, $H \cdots H$, $N \cdots N$, $O \cdots O$ взяты из [2], а для смешанных взаимодействий (например $C \cdots H$, $C \cdots N$ и т. д.) использованы соотношения

$$M_{12} = \frac{23,63 \cdot N_{12}}{q_{12}^6}, \quad (5)$$

$$N_{12} = [(N_{11}^{1/2} + N_{22}^{1/2}) / 2]^2, \quad (6)$$

$$q_{12} = 2 \frac{q_{11} q_{22}}{q_{11} + q_{22}}, \quad (7)$$

где индексы 1 и 2 обозначают сорт атома. Суммарная энергия взаимодействия $U = U_1 + U_2$ является функцией валентных углов α_i , длин связей l_{ij} между валентно-связанными i - и j -атомами. Считая l_{ij} известными, α_i можно определить из системы уравнений

$$\frac{\partial U}{\partial \alpha_i} = 0. \quad (8)$$

Для расчета конформации кроме энергий U_1 и U_2 необходимо учесть и другие вклады. К их числу относятся: а) энергия U_3 , затрачиваемая для выхода связей $O_{35} C_{15} (\beta_1)$, $C_{12} C_{11} (\beta_2)$, $C_5 C_4 (\beta_3)$, $C_8 N_{29} (\beta_4)$ из плоскостей бензилиденового и анилинового колец соответственно; б) энергия U_4 , необходимая для поворота плоскости $H_{32} C_{11} N_{29}$ вокруг связи $C_{12} C_{11}$ относительно бензилиденового кольца (θ_1), для поворота плоскости анилинового кольца вокруг связи $C_8 N_{29}$ относительно плоскости $H_{32} C_{11} N_{29}$ (θ_2) и для поворота плоскости $C_4 C_3 C_2$ вокруг связи $C_5 C_4$ (θ_3) относительно плоскости анилинового кольца; в) энергия торсионного вращения U_5 метильных групп при атомах кислорода O_{35} и углерода C_2 .

Эти энергии вычисляются при помощи следующих выражений [2]:

$$U_3 = \frac{1}{2} \sum_i C_i^* \beta_i^2, \quad (9)$$

где β_i — угол выхода соответствующей связи из плоскости ароматических колец, C_i^* — упругие постоянные;

$$U_4 = \frac{1}{2} \sum_k U_{ok} (1 - \cos \theta_k), \quad (10)$$

где θ_k — угол между соответствующими друг относительно друга поворачиваемыми плоскостями, U_{ok} — параметр, зависящий от группы атомов, которые повернуты на угол θ_k относительно соответствующих плоскостей;

$$U_5 = \frac{A_0}{2} \sum_n [1 + \cos (3 \varphi_n)], \quad (11)$$

где φ_n — угол поворота метильной группы. При расчете торсионной энергии этильных групп φ_n полагали равными нулю для гошт-конформации. Для метильной группы при атоме O_{35} у МББА принималось, что $\varphi_n = 0$ в том случае, когда плоскость $H_{40} C_{18} O_{35}$ перпендикулярна плоскости бензилиденового кольца.

Таким образом, для определения деформации валентных углов и двугранных углов между плоскостями соответствующих атомных групп систему уравнений (8) необходимо решить для случая, когда

$$U = U_1 + U_2 + U_3 + U_4 + U_5,$$

Несмотря на всю простоту модели атом-атом потенциалов, определение оптимальной конформации молекул требует значительного объема вычислительной работы. Если потенциальная поверхность имеет лишь один минимум, то, выбрав произвольную стартовую точку в пространстве независимых геометрических параметров, его можно найти, применяя один из методов минимизации потенциальной функции [2].

Можно считать, что нулевое приближение с некоторой точностью известно. Если поиск начинается с нулевого приближения, далекого от минимума, то выгоднее всего использовать линейные методы, в частности метод скорейшего спуска [3]. Конформации этих молекул были рассчитаны этим методом на ЭВМ ЕС 10—45.

Результаты расчетов приведены в таблице. Как следует из этой таблицы, валентные углы углерода C_{11} с хорошей точностью соответствуют

Таблица

Величины некоторых валентных углов α_i и двугранных углов θ_k между соответствующими плоскостями в молекулах МББА и ЭББА

Вещество	α_{COC}	α_{CCN}	$\alpha_{CCH_{23}}$	α_{CNC}	θ_1	θ_2	θ_3
МББА	129	122	118	134	84	0	80
ЭББА	127	120	117	133	86	0	80

его валентному состоянию (sp^2 -гибридизация). Что касается валентных углов атомов кислорода и азота, то они отличаются от теоретических значений. Большие деформации валентных углов этих атомов указывают на то, что метильная группа у кислорода сильно отталкивается соседними атомами бензилиденового кольца, а углерод C_{11} — от ближних атомов анилинского кольца.

Расчеты показывают, что у обеих молекул $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta_4 = 0$, угол между плоскостями двух ароматических колец в молекулах МББА и ЭББА составляет соответственно 84° и 86° , а плоскость углеродов бутильной группы с анилиновым кольцом составляет угол 80° .

ЛИТЕРАТУРА

1. Китайгородский А. И., Дашевский В. Г. Теоретическая и экспериментальная химия, 3, 35 (1967).
2. Дашевский В. Г. Конформация органических молекул. Изд. Химия, М., 1974.
3. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. Изд. Наука, М., 1966.

ՍԵՐՈՔՍԻԲԵՆԶԻԼԻՆԻՆ-Պ՝-Ն-ԲՈՒԹԻԼԱՆԻԼԻՆԻ ՆԿ
 ՍԵՐՈՔՍԻԲԵՆԶԻԼԻՆԻՆ-Պ՝-Ն-ԲՈՒԹԻԼԱՆԵԼԻՆԻ ՍՈԼԵՆՈԼԻՆԵՐԻ
 ԿՈՆՖՈՐՄԱՑԻԱՅԻ ՀԱՇՎՈՒՄԸ

Ա. Յ. ՍԱՐԿՍՅԱՆ, Ս. Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ, Խ. Վ. ՔՈՒԱՆՋՅԱՆ.

Կառարված է ՍԵՐՈՔՍԻԲԵՆԶԻԼԻՆԻՆ-Պ՝-Ն-ԲՈՒԹԻԼԱՆԻԼԻՆԻ և ՍԵՐՈՔՍԻԲԵՆԶԻԼԻՆԻՆ-Պ՝-Ն-ԲՈՒԹԻԼԱՆԵԼԻՆԻ մոլեկուլների կոնֆորմացիայի հաշվարկը. ծույց է տրված, որ այդ մոլեկուլներում երկու արոմատիկ օղակների հարթությունների կազմած երկնիստ անկյունը համա-

պատասխանարար 84 և 86 ատոմն է: Ազոտի և թթվածնի ատոմների վալենտական անկյունները մեծ դեֆորմացիայի են ենթարկված: Բութիլային խմբի ածխածնի ատոմների հարթությունը անիլինային օղակի հարթության հետ կազմում է 80° :

CALCULATION OF CONFORMATION OF p-METHOXYBENZYLIDENE-p'-n-BUTYLANILINE AND p-ETHOXYBENZYLIDENE-p'-n-BUTYLANILINE MOLECULES

A. Ts. SARKISYAN, S. M. YAILOYAN, Kh. V. KOTANDZHYAN

Conformations of p-methoxybenzylidene-p'-n-butylaniline and p-ethoxybenzylidene-p'-n-butylaniline molecules were calculated. The dihedral angle between the planes of two aromatic rings of these molecules was shown to be 84° and 86° respectively. The valence angles with nitrogen and oxygen atoms were strongly deformed. The plane of the butyl group of carbons and that of the aniline ring form an angle of 80° .

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 22, вып. 6, 335—339 (1987)

УДК 532.516

ВОЗБУЖДЕНИЕ РЕГУЛЯРНЫХ КОНВЕКТИВНЫХ ДВИЖЕНИЙ В ЖИДКОСТЯХ АКУСТИЧЕСКОЙ ВОЛНОЙ

Р. С. АКОПЯН, Р. Б. АЛАВЕРДЯН, Ю. С. ЧИЛИНГАРЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 30 октября 1986 г.)

Теоретически предсказана и экспериментально подтверждена возможность возбуждения сильных конвективных движений в жидкостях со свободной поверхностью под действием радиационного давления акустической волны с пространственно-периодической структурой распределения интенсивности. Приведены оценки для других механизмов конвективных гидродинамических движений, обусловленных поглощением акустической волны с периодической структурой распределения интенсивности. Обнаруженный эффект дает возможность визуализировать распределение интенсивности акустической волны милливаттной мощности в поперечном сечении пучка.

1. Рассмотрим горизонтальный тонкий слой жидкости с одной свободной поверхностью: нижняя поверхность $z = 0$ является жесткой, а верхняя — $z = L$ — свободной. Пусть на слой со стороны либо свободной поверхности, либо жесткой поверхности нормально к ним падают две акустические волны с одинаковой интенсивностью I_0 и с волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ ($k_1 = k_2$), образуя интерференционную картину интенсивности на границе $z = L$. Известно, что если поверхность полностью отражает излучение акустической волны, то акустическое давление связано с интенсивностью выражением $p = 2I/c$, c — скорость звука в среде. Поэтому на полностью отражающей свободной поверхности имеем пространственно-периодическое распределение радиационного давления акустической волны

$$p_{\text{ак}}(L) = 2p_1(1 + \cos kx). \quad (1)$$