高分子链排斥体积效应的随机研究

本文运用随机过程理论，对高分子链构象中的一个重要问题——高分子链的排斥体积效应加以研究，并且指出，在讨论排斥体积效应时，用 Brown 运动建立起来的高分子链数学模型仍然有效.

从 n 维 Brown 运动这个数学模型出发，我们提出了高分子链排斥体积效应的概率理论，定义了在考虑排斥体积效应时，高分子链构象的数学模型所具有的部分转移密度:

$$q_B(L,x,y) = P(L,x,y) - \int_0^L\int_{R^n} P_x(\tau\in ds, X(\tau)\in dx^*)$$
$$\int_c^L\int_{R^{n-3}} P_{x^*}(t\in ds', X(s+t)\in dx^{**})$$
$$\cdot P(L-(s+s'),x^{**},y)$$

其中 B 是高分子链已占有的区域. 并且得到了在简化排斥体积模型下的部分转移密度表达式:

$$q_B(n,x,y) = \int\prod_{j=0}^{n} q_j(t_{j+1},x_{pj},dx_{pj+1}) \times \delta\left(\sum_{j=0}^{n}(x_{pj+1}-x_{pj}) - R\right),$$

这里 x_{pj} 表示高分子链第 j 个位置矢量，$y-x=R$, B_j 是链中第 j 个主链原子的排斥区域，它是一个三维球. 同时，我们可以推得

$$q(t_{j+1},x_{pj},x_{pj+1}) = P(t_{j+1},x_{pj},x_{pj+1})\left[1-\sum_{K=0}^{j-1} P_{x_{pj}}(t_{B_K}\leqslant t_{j+1})\right],$$

其中 $P_{x_{pj}}(t_{B_K}\leqslant t_{j+1})$ 意味着自排斥球域 B_K 之外某一位置 x_{pj} 在链长小于等于 t_{j+1} 时，第一次到达 B_K 的概率. 由偏微分方程理论得到 $P_{x_{pj}}(t_{B_K}\leqslant t_{j+1})$ 的解析表达式:

$$P_{x_{pj}}(t_{B_K}\leqslant t_{j+1}) = 1-\sum_{m=1}^{\infty} c_m\exp\left\{-\frac{\mu_m^2}{R_K^2}t_{j+1}\right\},$$

其中 μ_m 是 Bessel 函数 $J_0(z)$ 的正零点，R_K 是球域 B_K 的半径.

另一方面，高分子链的排斥体积可以通过参数 α^2 来表示，$\langle R^2\rangle = \langle R_0^2\rangle\alpha^2$. $\langle R^2\rangle$ 是考虑排斥体积效应时的均方末端距，$\langle R_0^2\rangle$ 是不考虑排斥体积时的均方末端距. 我们得到的 α^2 以一级数形式出现，同时，也找到了部分转移密度与 Fokker-Plank 方程之间的关系.

吴让泉　李繁亭　程正迪
(华东纺织工学院)

铂族元素新矿物——硫铑矿的初步研究

硫铑矿 Rh_2S_3 是一种铂族元素新矿物. 根据化学组成将该新矿物命名为硫铑矿.

硫铑矿是 1979 年发现于河北高寺台含铂超基性岩的与铬矿化有关的纯橄岩型铂矿床的砂铂矿中.

电子探针分析(以黄铁矿 FeS_2 及金属铑 Rh 作标样)结果是 S 31.05; Rh 68.80; 总量 99.85%. 它的化学式是 Rh_2S_3.

X 射线单晶研究表明该矿物为斜方晶系，$a=6.167$ Å; $b=8.493$ Å; $c=5.987$ Å. 空间群 $Pnca$, $z=4$. X 射线粉末图的强线是(以 Å 为单位，括弧内为强度): 3.01(100); 2.161(70); 1.761(60); 1.729(80); 1.269(60).

矿物的颜色是亮灰色略带粉红色调·颗粒大小是 $85\times67\times50\mu m$, $VHN_{20g}=575kg/mm^2$. 比重为 6.452g/cm³ (按分子式 Rh_2S_3 计算). 强非均质性. 矿物的反射率为 (λ,R_1',R_2'): 405nm, 44.84, 46.21; 436nm, 45.74, 47.20; 480nm, 49.74, 46.62; 526nm, 49.86, 46.98; 546nm, 51.42, 47.36; 578nm, 51.23, 47.19; 589nm, 51.25, 47.52; 622nm, 50.03, 47.07; 644nm, 49.17, 46.44; 656nm, 48.80, 46.77; 664nm, 49.37, 46.55; 700nm, 48.86, 45.09.

矿物的颜色指数 (SE): R'_{vis_1} 50.6002, x 0.3384, y 0.3422, λ_d 572, P_e 0.0436; R'_{vis_2} 47.1592, x 0.3341, y 0.3342, λ_d 587, P_e 0.0064.

本文的硫铑矿标本存放在地质部地质博物馆.

陈克樵
(中国地质科学院矿床研究所)
施倪承　彭志忠
(武汉地质学院北京研究生部X光实验室)