

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМЕНИ Б.И.СТЕПАНОВА
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

УДК 538.975::536.4.033+53.097

КРЫЛОВА
Нина Георгиевна

**ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ
ЛЕНГМЮРОВСКОГО МОНОСЛОЯ НА ОСНОВЕ
ЛАГРАНЖ-ФИНСЛЕРОВА ФОРМАЛИЗМА**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Минск – 2018

Научная работа выполнена в Белорусском государственном университете

Научный руководитель: **Редьков Виктор Михайлович**,
доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики, ГНУ «Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси».

Официальные оппоненты: **Панков Александр Альбертович**
доктор физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник Гомельского государственного технического университета имени П.О. Сухого

Бабичев Леонид Филиппович
кандидат физ.-мат. наук, заведующий лабораторией моделирования и суперкомпьютерных технологий в ядерной физике и энергетике ГНУ "Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны" НАН Беларуси

Оппонирующая организация: НИУ "Институт ядерных проблем" БГУ

Защита состоится 1 июня 2018 г. в 15⁰⁰ на заседании совета по защите диссертаций Д 01.05.02 при ГНУ "Институт физики имени Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси" по адресу: 220072, Республика Беларусь, г. Минск, пр. Независимости 68; тел. 284-15-59.

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке имени Якуба Коласа Национальной академии наук Беларуси

Автореферат разослан 26 апреля 2018

Ученый секретарь совета
по защите диссертаций,
кандидат физ.-мат. наук

Ю.П. Выблый

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время для изготовления высокоупорядоченных наноматериалов на основе органических амфифильных молекул применяется технология Ленгмюра – Блоджетт (ЛБ). Получаемые с использованием ЛБ-технологии тонкопленочные материалы применяются для создания композитных сенсорных и сегнетоэлектрических наноструктур для электроники. Формирование ЛБ-пленок достигается посредством последовательного переноса сжатых до кристаллического состояния двумерных ленгмюровских монослоев на твердую подложку, при этом структура доменов сжатых монослоев на поверхности жидкой субфазы сохраняется при их переносе. В этой связи актуальной является задача теоретического моделирования процессов кристаллизации ленгмюровских монослоев.

В процессе сжатия монослоя наблюдаются последовательные двумерные фазовые переходы 1-го рода из состояния растянутой жидкости в жидкокристаллическое, а затем – в кристаллическое состояние. При теоретическом описании двумерных фазовых переходов используется теория среднего поля Ландау, при этом фазовый переход описывается как результат изменения симметрии. Также используются методы молекулярной динамики с полуэмпирическими парными потенциалами, описывающими взаимодействие гидрофобных частей молекул (например, потенциалом Леннарда-Джонса).

Задача моделирования процессов кристаллизации ленгмюровских монослоев до сих пор остается нерешенной полностью ввиду ее сложности. Кроме взаимодействия между амфифильными молекулами необходимо учитывать их взаимодействие с водной субфазой: образование водородных связей, изменение структуры прилегающего к поверхности слоя воды под действием амфифильных молекул, влияние двойного электрического слоя на термодинамику фазовых переходов. Роль последнего в формировании ленгмюровских монослоев до сих пор не рассматривалась.

Наиболее сложным при построении микроскопических теорий конденсированных сред является выбор модельных потенциалов межатомных взаимодействий. На практике используются различные эффективные потенциалы взаимодействия между ближайшими атомами, которые подбираются на основе полуэмпирических соображений. При описании монослоев Ленгмюра методами молекулярной динамики обычно применяют потенциалы, учитывающие только парные взаимодействия. Показано, что для непротиворечивого описания изменения типа упорядочения при фазовых переходах необходимо учитывать взаимодействия между атомами в одиннадцати координационных сферах и более. Реалистичное описание фазовых переходов в конденсированных средах должно учитывать очень большое число частиц, что делает невозможным использование методов молекулярной динамики.

На границе раздела фаз (монослой амфифильных молекул – водная среда) возникает разность потенциалов двойного электрически заряженного слоя, который создается распределением электрических зарядов ионизованных гидрофильных групп амфифильных молекул и противоионов в воде. Возникшая разность потенциалов приводит к появлению дополнительного вклада в величину поверхностного натяжения монослоя. Для произвольных двухфазных систем этот вклад, обусловленный электрокапиллярным эффектом, исследован феноменологически в рамках термодинамики. В диссертационной работе учет электрокапиллярности позволил описать взаимодействие амфифильных молекул с водной субфазой и исследовать влияние двойного слоя на формирование монослоев.

В рассматриваемой области имеется ряд нерешенных проблем. Так, экспериментально установлено, что протекание двумерного фазового перехода жидкость - кристаллическое состояние существенно зависит от свойств амфифильных молекул и условий формирования монослоя, т.е от ионного состава субфазы и скорости сжатия. Влияние скорости сжатия на динамику фазового перехода обусловлено электрокапиллярными явлениями, а именно поворотом диполей на границе раздела фаз и перераспределением плотности заряда двойного электрически заряженного слоя Гельмгольца. Ранее при построении моделей фазовых переходов первого рода в ленгмюровских монослоях электрокапиллярные явления на границе раздела фаз не учитывались. Однако, экспериментальные исследования показывают, что их влияние является существенным. Это делает теоретическое описание электрокапиллярных эффектов важным для понимания процессов структуризации и формирования доменной структуры монослоев.

Неевклидова геометрия используется для описания гравитационного взаимодействия, элементарных частиц и наноструктур. Геометрические структуры (связности Берри и Зака) успешно используются в физике конденсированного состояния. В математической литературе уже много лет существует обобщение для стандартного физического лагранжева формализма, оно основано на геометрическом подходе Финслера-Лагранжа. При этом свойства физических систем исследуются с помощью хорошо развитого аппарата финслеровой геометрии: связностей Черна и Бартеля, кривизн Римана и Бервальда и других геометрических объектов.

В диссертационной работе динамика ленгмюровского монослоя моделируется в рамках финслер-лагранжевой геометрической теории. Для этого проводится геометризация взаимодействий, определяющих электрокапиллярные явления. Предлагается новая параметризация конфигурационного финслерова пространства и на ее основе описывается динамика двумерного фазового перехода 1-го рода.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами (проектами), темами

Диссертационная работа выполнялась в рамках темы "Разработка биосенсорных систем на основе пленок Ленгмюра-Блоджетт и углеродных нанотрубок для оценки токсического действия химических веществ на клетки крови и мозга" Государственной программы научных исследований "Конвергенция" (задание "Конвергенция 3.2.01.2", 2011–2015 гг.); проекта БРФФИ "Применения методов римановой и финслеровой геометрий к исследованию 2-мерных микро и макро систем" (№ Ф11М-152, 2011–2013 гг.); проекта БРФФИ «Обобщение геометрического подхода Финслера-Лагранжа в применении к поляризационной оптике формирующихся монослоев Ленгмюра – Блоджетт» (№ Ф12РА-002, 2012–2014 гг.); проекта БРФФИ «Применения геометрических методов Финслера-Лагранжа в физике тонких пленок» (№ Ф14РА-006, 2014–2016 гг.); проекта БРФФИ "Применение методов римановой и финслеровой геометрий к исследованию динамических систем в квантовой механике и физике тонких пленок" (№ Ф16РА-009, 2016–2018 гг.).

Тема диссертации соответствует пункту 12 "Междисциплинарные исследования" перечня приоритетных направлений научных исследований Республики Беларусь на 2016-2020 годы, утвержденного постановлением Совета Министров Республики Беларусь № 190 от 12 марта 2015 г.

Диссертационная работа соответствует пункту 1 "Изучение различных состояний вещества и физических явлений в них" и пункту 3 "Математические методы теоретической физики (развитие и применение теории операторов, алгебр, групп и их представлений, геометро-топологических подходов)" паспорта специальности "01.04.02 – Теоретическая физика"

Цель и задачи исследования

Целью настоящей работы является развитие геометрического подхода Финслера-Лагранжа для моделирования фазовых переходов 1-го рода жидкость-кристаллическое состояние в ленгмюровском монослое с учетом зависящих от скорости сжатия электрокапиллярных явлений.

Поставленная цель предполагает решение следующих **задач**:

1. Построить эффективный потенциал, который определяет суммарный эффект взаимодействия молекул субфазы с молекулами ленгмюровского монослоя и учитывает влияние процессов перераспределения зарядовой плотности двойного слоя.

2. С учетом распределения зародышей фаз по временам релаксации в процессе нуклеации для монослоя развить методы моделирования поверхностных явлений с применением геометрического подхода Финслера–Лагранжа, построить лагранжиан и финслерову метрическую функцию конфигурационного пространства монослоя.

3. С использованием аналитических и численных методов исследовать особенности динамики фазовых переходов 1-го рода в ленгмюровских монослоях при наличии зародышей фаз с одним временем релаксации и с множеством времен релаксации.

4. Изучить поведение геометрических структур конфигурационного финслерова пространства, установить связь между этими характеристиками и термодинамическими параметрами монослоя: поверхностным давлением и сжимаемостью.

Объект исследования - двумерные ленгмюровские монослои, формирующиеся на поверхности водной субфазы. **Предмет исследования** - динамика фазового перехода жидкость - кристаллическое состояние в монослое в условиях быстрого сжатия, когда требуется учитывать эффекты перераспределения плотности электрического заряда двойного слоя и возникновение зародышей фаз с различными временами релаксации.

Научная новизна

Представленные в диссертации результаты являются оригинальными. Разработанная в работе геометрическая модель на основе финслерова представления конфигурационного пространства монослоя находится в русле мировых исследований, связанных с обобщением стандартного физического лагранжева формализма.

В диссертации впервые рассмотрено влияние электрокапиллярных явлений на формирование ленгмюровских монослоев и построен зависящий от скорости сжатия потенциал.

Новым является моделирование динамики фазового перехода при наличии зародышей фаз с различными временами релаксации. На основе анализа приближенных аналитических выражений для геодезических в конфигурационном пространстве монослоя для случаев одного времени релаксации и модельного распределения времен релаксации впервые показано, что существование зародышей фаз с различными временами релаксации приводит к появлению эффективной центробежной силы, величина которой зависит от градиента электрокапиллярных сил.

Новыми также являются полученные аналитические выражения для поверхностного давления и сжимаемости монослоя как функции кривизны

Бервальда конфигурационного финслерового пространства, которые учитывают зависимость термодинамических параметров монослоя от скорости сжатия, заряда молекул, времен релаксации зародышей фаз.

Положения, выносимые на защиту

1. Зависящий от скорости сжатия эффективный потенциал, описывающий электрокапиллярные взаимодействия в монослое; параметризация лагранжиана системы, которая позволяет осуществить финслеровую геометризацию взаимодействия и описать динамику фазового перехода жидкость-кристаллическое состояние при наличии зародышей фаз с различными временами релаксации.

2. Приближенный метод анализа уравнений Эйлера-Лагранжа, описывающих динамику монослоя в конфигурационном финслеровом пространстве; построение нулевого приближения при фиксированном времени релаксации и более точного приближения с модельным распределением времен релаксации.

3. Аналитические выражения для поверхностного давления и сжимаемости монослоя как функций кривизны Бервальда финслерового пространства; анализ зависимости термодинамических параметров монослоя от скорости сжатия и времен релаксации зародышей фаз; теоретическое описание поведения изотерм и сжимаемости монослоя в области фазового перехода.

Личный вклад соискателя

Основные результаты диссертации получены соискателем самостоятельно. Соавторами публикаций по теме диссертации являются Г.В. Грушевская, В.М. Редьков, В. Балан, М. Неагу, А. Оана. Эксперименты по получению изотерм сжатия выполнены И.В. Липневичем. Работа осуществлялась под общим руководством научного руководителя В.М. Редькова, совместно формулировались задачи исследования, обсуждались основные результаты и положения, выносимые на защиту. Личный вклад Н.Г. Крыловой в получение результатов и положений, выносимых на защиту, является определяющим.

Апробация результатов диссертации

Результаты исследований, включенных в диссертацию, докладывались на следующих конференциях: Международная конференция "Non-euclidean geometry and its applications", Bolyai-Gaus-Lobachevsky conference series (Клуж-Напока, Румыния, 2010); Серия международных конференций "Finsler

Extensions of Relativity Theory" (Россия-Румыния, 2011-2014); Международная конференция "Foundations and Advances in Nonlinear Science" (Минск, Беларусь, 2012, 2014, 2016); Международная научная конференция «Физико-математические проблемы создания новой техники» (Москва, Россия, 2014); Международная конференция "Methods on non-euclidean geometry in physics and mathematics", Bolyai–Gauss–Lobachevsky conference series (Минск, Беларусь, 2015); Международная школа-конференция "Saint-Petersburg OPEN 2015" (Санкт-Петербург, Россия, 2015); Международная конференция "Гравитация, космология и механика сплошных сред" (Москва, Россия, 2016); Международная конференция "The International Conference of Differential Geometry and Dynamical Systems" (Румыния, 2015, 2016); Международная научная конференция "Physical Interpretations of Relativity Theory (PIRT-2017)" (Москва, Россия, 2017); VI Конгресс физиков Беларуси (Минск, Беларусь, 2017).

Опубликованность результатов диссертации

Результаты диссертации опубликованы в 28 научных работах, из них 7 статей общим объёмом 3,2 авторских листа в рецензируемых изданиях, удовлетворяющих пункту 18 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий в Республике Беларусь, 5 статей в сборниках материалов конференций, 16 тезисов.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из перечня условных обозначений, введения, общей характеристики работы, четырех глав, заключения, библиографического списка. Полный объем диссертации составляет 122 страницы. В диссертации имеется 49 рисунков, занимающих в совокупности 24 страниц. Библиографический список занимает 10 страниц и состоит из 127 наименований, в том числе 28 наименований – собственные публикации соискателя.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В главе 1 дан обзор основных подходов к описанию двумерных фазовых переходов первого рода в ленгмюровских монослоях. На основании анализа результатов, полученных в рамках моделей, использующих теорию среднего поля Ландау, методы молекулярной динамики, теорию Ван-дер-Ваальса, обоснована необходимость дальнейшего развития кинетических моделей фазовых переходов в монослоях Ленгмюра, которые позволят описать влияние скорости сжатия монослоя на поведение изотерм в области фа-

зовых переходов первого рода.

Перечислены модельные потенциалы межмолекулярного взаимодействия в монослое и взаимодействия амфифильных молекул с субфазой. Прежде всего, это парные потенциалы типа Леннарда-Джонса. При моделировании конденсированных состояний для корректного описания изменения симметрии при фазовых переходах типа упорядочения необходимо учитывать взаимодействие не только с ближайшими соседями, но и с дальними молекулами. Поэтому при исследовании системы методами молекулярной динамики используются максимально упрощенные модели молекул и простые потенциалы: потенциал твердых сфер, прямоугольной потенциальной ямы и др. Это делает невозможным учесть микроскопические параметры структурирующихся монослоев. Известные потенциалы для описания взаимодействия амфифильных молекул с субфазой также не позволяют учесть свойства субфазы: ионный состав, двойной электрический слой, перераспределение плотности заряда на границе раздела фаз. Обзор литературы показывает необходимость установления более реалистичного эффективного потенциала, учитывающего взаимодействие большого числа молекул монослоя и позволяющего исследовать зависимость процесса формирования монослоя от параметров субфазы.

Описаны основные положения аппарата финслеровой геометрии, которые используются в диссертационной работе.

В главе 2 рассматриваются процессы перераспределения плотности электрического заряда двойного слоя в процессе сжатия ленгмюровского монослоя.

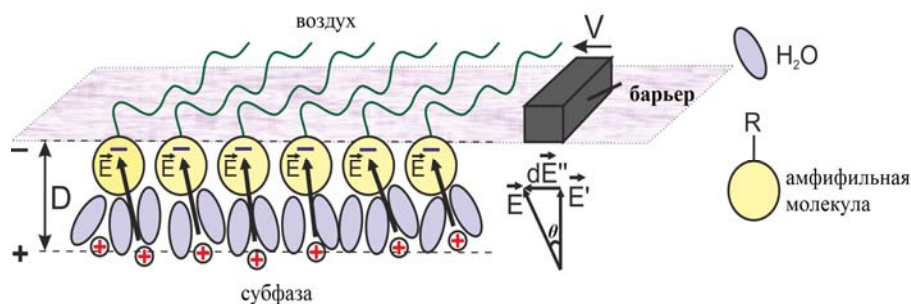


Рисунок 1. – Поворот диполей двойного электрического слоя в процессе сжатия

В разделе 2.1 рассмотрен круговой монослой, сжимающийся с постоянной радиальной скоростью V . На рисунке 1 схематически представлен монослой в процессе сжатия. Гидрофильные группы амфифильных молекул погружены в воду, а гидрофобные части находятся снаружи. В воде гидрофильные группы молекул диссоциируют на положительно заряженный ион водорода и отрицательно заряженную гидрофильную группу. При этом молекулы воды и положительно

заряженные ионы электролита ориентируются таким образом, чтобы компенсировать заряд амфифильных молекул, образуя в результате двойной электрический слой толщиной D . Отрицательно заряженная гидрофильная группа и положительно заряженная «шуба» ионов и молекул воды формируют диполь. Сжатие монослоя приводит к движению отрицательно заряженных молекул относительно положительно заряженной «шубы» ионов и молекул воды. Напряженность электрического поля \vec{E} двойного электрического слоя будет направлена под некоторым углом θ к нормали плоскости монослоя, что создает дополнительную радиальную компоненту силы, действующую против направления движения сжимающего барьера. Тогда поверхностная энергия монослоя будет изменяться при сжатии.

С использованием теории электрокапиллярности, дающей зависимость коэффициента поверхностного натяжения p от разности потенциалов на границе раздела фаз Φ в виде

$$qn = -\left(\frac{\partial p}{\partial \Phi}\right)_r, \quad (1)$$

где q – заряд одной молекулы, $n \equiv n(r, t)$ – поверхностная плотность, находим эффективный потенциал U в произвольной точке монослоя с координатами (r, t) , вычисляя работу, совершаемую внешней сжимающей силой над тонким кольцом монослоя при перемещении его из начального положения в конечное с координатой r . При этом используется допущение, что угол поворота диполей θ зависит от соотношения скоростей движения барьера и релаксационных процессов в «шубе», это означает, что скорость сжатия не должна быть слишком малой. Предполагаем, что в процессе сжатия устанавливается некоторое эффективное значение угла поворота θ , зависящее от радиальной координаты r . Используем модельное и простейшее предположение: $\operatorname{tg} \theta = kr$. Для распределения поверхностной плотности молекул $n(r, t)$ используем полуэмпирическую зависимость:

$n = n_0 \frac{r}{R_0} e^{\frac{Vt}{r}}$. С учетом вышесказанного полученный потенциал имеет вид:

$$U(\dot{r}, r, t) = K \left[-P_{11} e^{\frac{2Vt}{r}} + P_{12} + \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \operatorname{Ei}\left(2 + \frac{2Vt}{r}\right) - \frac{V}{\dot{r}} \left(P_{21} e^{\frac{2Vt}{r}} - P_{22} + 8V^5 t^5 \operatorname{Ei}\left(\frac{2Vt}{r}\right) - \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \operatorname{Ei}\left(2 + \frac{2Vt}{r}\right) \right) \right], \quad (2a)$$

$$P_{11} = 4V^4 t^4 r + 18V^3 t^3 r^2 + 32V^2 t^2 r^3 + 29Vtr^4 + 17r^5, \quad P_{12} = (r + Vt)^5 \left(17 - \frac{8}{e^2} \operatorname{Ei}(2) \right),$$

$$P_{21} = 16V^3 t^3 r^2 + 30V^2 t^2 r^3 + 26Vtr^4 + 11r^5,$$

$$P_{22} = \left(5V^4 t^4 r + 10V^3 t^3 r^2 + 10V^2 t^2 r^3 + 5Vtr^4 + r^5 \right) \left(17 - \frac{8}{e^2} \operatorname{Ei}(2) \right), \quad K = \frac{\pi q^2 k n_0^2}{5\epsilon\epsilon_0 R_0^2},$$

где n_0 и R_0 – поверхностная плотность и радиус монослоя в начальный момент времени $t_0=0$; k – коэффициент, характеризующий ориентационную релаксацию диполей; Ei – интегральная показательная функция:

$$Ei(z) \stackrel{def}{=} - \int_{-z}^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx.$$

Для дальнейшего анализа удобно перейти к безразмерным параметрам $x \equiv r/R_0$, $\alpha \equiv Vt/R_0$. Точка над символом будет обозначает производную по α : $\dot{x} = dx/d\alpha$, а производная по t пересчитывается к производной по α согласно соотношению $\frac{d}{dt} = \frac{V}{R_0} \frac{d}{d\alpha}$. Выражение для потенциала записывается в виде

$$U(\dot{x}, x, \alpha) = KR_0^5 \left[-P_{11} e^{\frac{2\alpha}{x}} + P_{12} + \frac{8}{e^2} (x+\alpha)^5 Ei\left(2 + \frac{2\alpha}{x}\right) - \right. \\ \left. - \frac{1}{\dot{x}} \left(P_{21} e^{\frac{2\alpha}{x}} - P_{22} + 8\alpha^5 Ei\left(\frac{2\alpha}{x}\right) - \frac{8}{e^2} (x+\alpha)^5 Ei\left(2 + \frac{2\alpha}{x}\right) \right) \right], \quad (26)$$

$$P_{11} = 4\alpha^4 x + 18\alpha^3 x^2 + 32\alpha^2 x^3 + 29\alpha x^4 + 17x^5, \quad P_{12} = (x+\alpha)^5 \left(17 - \frac{8}{e^2} Ei(2) \right),$$

$$P_{21} = 16\alpha^3 x^2 + 30\alpha^2 x^3 + 26\alpha x^4 + 11x^5,$$

$$P_{22} = \left(5\alpha^4 x + 10\alpha^3 x^2 + 10\alpha^2 x^3 + 5\alpha x^4 + x^5 \right) \left(17 - \frac{8}{e^2} Ei(2) \right).$$

На рисунке 2 представлены графики зависимости эффективного потенциала (нормированного на коэффициент KR_0^5 : $U/KR_0^5 \rightarrow U$) от переменной x при разных степенях сжатия α .

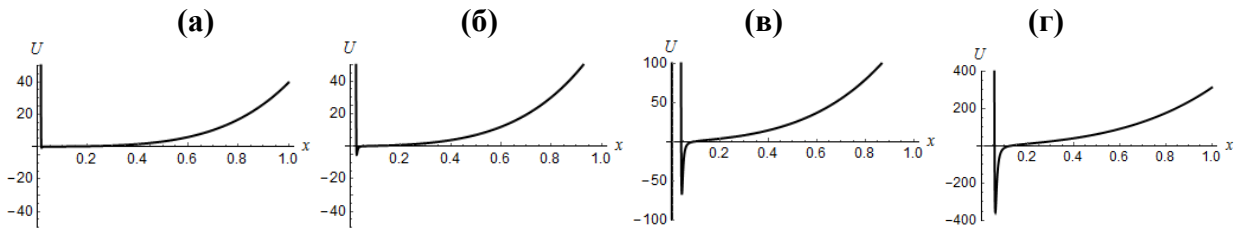


Рисунок 2. – Зависимость потенциала $U(\dot{x}, x, \alpha)$ от координаты x при различных степенях сжатия монослоя $\alpha = 0,2$ (а), $0,3$ (б), $0,5$ (в), $0,7$ (г).

Отмечаем, что при разных степенях сжатия потенциал имеет выраженный локальный минимум. Наличие минимума потенциальной функции $U(\dot{x}, x, \alpha)$ (2) указывает на то, что такой потенциал может моделировать появление локальных структур (доменов кристаллической фазы) в монослое в процессе сжатия.

В разделе 2.2 рассмотрена микроскопическая теория структуризации монослоя в метастабильном состоянии как эволюция процессов распа-

да/образования элементарных зародышей кристаллической фазы. Предполагается, что каждый зародыш фазы характеризуется своим временем релаксации τ_i . В пределе бесконечного числа времен релаксации возможен предельный переход:

$$\tau_i = \frac{\Delta t_i}{\Delta s} \quad \rightarrow \quad \tau \equiv \dot{\xi} = \frac{dt}{ds}, \quad (3)$$

где s – эволюционный параметр.

В диссертации предполагается гетерогенная нуклеация, когда образование/распад зародышей происходит на протяжении всего фазового перехода. В этом случае функция распределения для статистической системы должна зависеть от моментов образования t_i и времен релаксации τ_i зародышей $p(\vec{r}_1, \vec{r}_1, t_1, \tau_1; \vec{r}_2, \vec{r}_2, t_2, \tau_2; \dots; \vec{r}_N, \vec{r}_N, t_N, \tau_N)$. Когда N велико ($N \rightarrow \infty$), с учетом параметризации времен релаксации (3) можно перейти к непрерывному пределу $p(\vec{r}(s), \vec{r}(s), t(s), \dot{\xi}(s))$. Таким образом, точка в фазовом пространстве $\{\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t, \dot{\xi}\}$ определяет расширенное конфигурационное пространство монослоя, а распределение зародышей фаз по временам релаксации описывается с помощью параметризации (3).

Построены функции Лагранжа, описывающие динамику зародышей фаз в монослое. С учетом распределения зародышей кристаллической фазы по временам релаксации (3) параметризованный лагранжиан имеет вид

$$L_S = ma_c^2 n_c \frac{\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2}{2\dot{\xi}} - \frac{K}{n_c} \dot{\xi} \left[-P_{11} e^{\frac{2Vt}{r}} + P_{12} + \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \text{Ei}\left(2 + \frac{2Vt}{r}\right) - \right. \\ \left. - \frac{V}{\dot{r}} \left(P_{21} e^{\frac{2Vt}{r}} - P_{22} + 8V^5 t^5 \text{Ei}\left(\frac{2Vt}{r}\right) - \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \text{Ei}\left(2 + \frac{2Vt}{r}\right) \right) \right]; \quad (4)$$

$$t = t(s), \quad \vec{r} = \vec{r}(s), \quad \dot{\xi} = dt/ds, \quad \dot{\vec{r}} = d\vec{r}/ds,$$

где n_c и a_c – критические значения поверхностной плотности и размера зародыша кристаллической фазы.

В разделе 2.3 проведена геометризация электрокапиллярных взаимодействий в монослое. Основным является требование, чтобы траектории частиц в обычном пространстве под действием внешних сил соответствовали геодезическим в эффективном финслеровом пространстве. В соответствии с тем, что геодезические по определению являются экстремальными кривыми, а траектории частиц определяются из условия экстремальности действия S , квадрат финслеровой метрической функции F^2 выбирается пропорциональным дифференциалу действия:

$$F^2 = \Lambda^2 \dot{\xi}^2 - \frac{dS}{ds} = \Lambda^2 \dot{\xi}^2 - L_S(t(s)) \dot{\xi}. \quad (5)$$

С учетом выражения для лагранжиана L_S (4), функция F^2 имеет вид

$$F^2 = A \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B \dot{\xi}^2 - C \frac{(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2)}{2}, \quad (6)$$

где

$$B = \Lambda^2 + \tilde{p} \left(-P_{11} e^{\frac{2Vt}{r}} + P_{12} + \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \text{Ei} \left(2 + \frac{2Vt}{r} \right) \right), \quad (7)$$

$$A = -\tilde{p} V \left(P_{21} e^{\frac{2Vt}{r}} - P_{22} + 8V^5 t^5 \text{Ei} \left(\frac{2Vt}{r} \right) - \frac{8}{e^2} (r + Vt)^5 \text{Ei} \left(2 + \frac{2Vt}{r} \right) \right), \quad C = ma_c^2 n_c, \quad \tilde{p} = \frac{K}{n_c};$$

Метрический тензор, соответствующий функции F^2 , равен

$$g_{ij}(x^k, y^k) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F^2}{\partial y^i \partial y^j} = \begin{pmatrix} 3A \frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} + B & -\frac{3}{2} A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^2 & 0 \\ -\frac{3}{2} A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^2 & A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^3 - \frac{C}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{C}{2} r^2 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} x^i &\equiv (t, r, \phi), \\ y^i &\equiv \left(\dot{\xi} = \frac{dt}{ds}, \dot{r}, \dot{\phi} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

В главе 3 проведено исследование динамики монослоя в построенном финслеровом пространстве.

Уравнения для геодезических записываются так:

$$\frac{dy^i}{ds} + 2G^i = 0; \quad (9)$$

где компоненты вектора G^i равны

$$G^1 = \frac{A}{4\Delta_2} \left[\frac{1}{2} A_t \frac{\dot{\xi}^6}{\dot{r}^4} + B_t \frac{\dot{\xi}^5}{\dot{r}^3} + \frac{1}{2} B_r \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + \frac{3}{2} C r \frac{\dot{\xi}^2 \dot{\phi}^2}{\dot{r}^2} \right] - \frac{C}{8\Delta_2} \left[2A_t \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B_t \dot{\xi}^2 + 3A_r \dot{\xi}^2 + 2B_r \dot{\xi} \dot{r} \right],$$

$$G^2 = \frac{3}{4} \frac{A}{\Delta_2} \left[-\frac{1}{2} A_r \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + \frac{1}{2} B_t \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + C r \frac{\dot{\xi} \dot{\phi}^2}{\dot{r}} \right] - \frac{B}{4\Delta_2} \left[A_t \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + 2A_r \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B_r \dot{\xi}^2 - C r \dot{\phi}^2 \right], \quad (10)$$

$$G^3 = \frac{1}{r} \dot{r} \dot{\phi},$$

где

$$\Delta_2 = \frac{3A^2}{4} \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^4 + AB \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^3 - \frac{3AC}{2} \frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} - \frac{BC}{2}, \quad A_t = \frac{\partial A}{\partial t}, A_r = \frac{\partial A}{\partial r}, B_t = \frac{\partial B}{\partial t}, B_r = \frac{\partial B}{\partial r}.$$

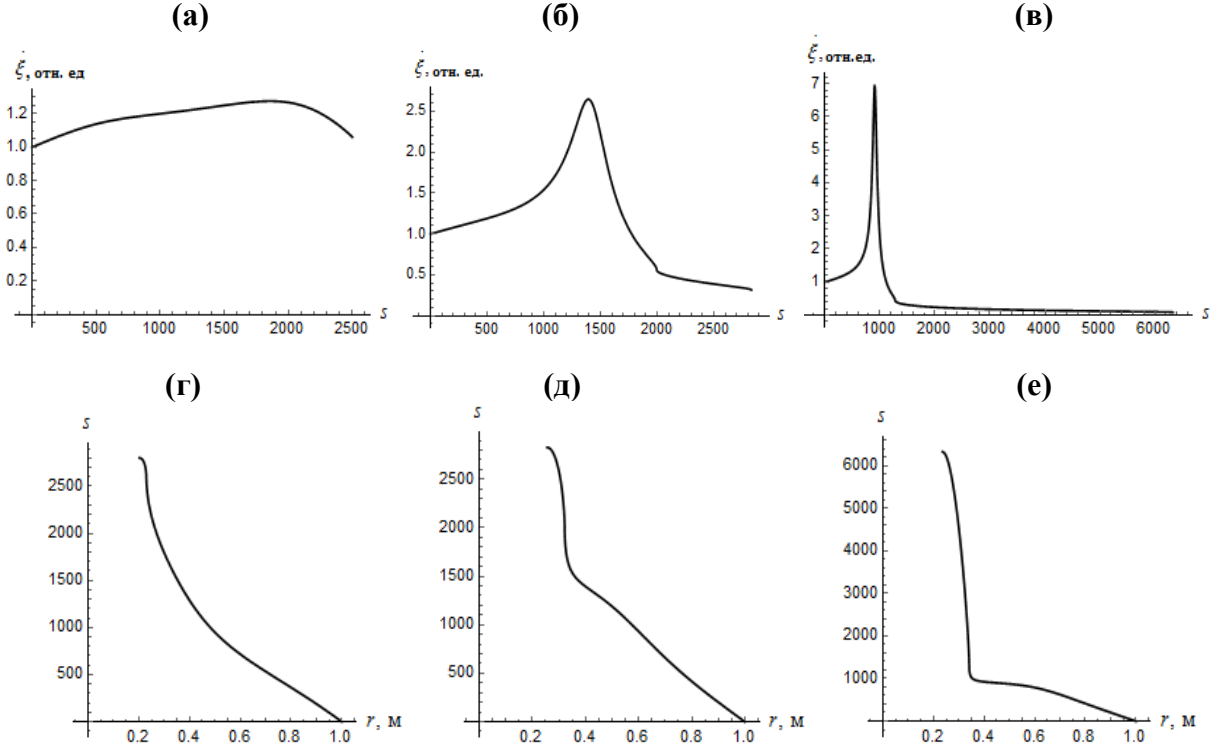
На рисунке 3 приведены результаты численного анализа уравнений (9)-(10) при различных скоростях сжатия V . Максимум на кривой $\dot{\xi}(s)$ соответствует появлению зародышей фаз выше критического размера. Приращение поверхностного давления Δp , обусловленного появлением в метастабильном монослое зародышей кристаллической фазы, пропорционально эволюционному параметру s ; зависимость $s(r)$ характеризует поведение изотерм сжатия.

В разделах **3.4-3.5** исследована динамика двумерного фазового перехода при малых скоростях сжатия. Сравнивается поведение системы при одном времени релаксации и при (модельном) распределении времен релаксации

$\dot{\xi} = 1 + \alpha/r(s)$. Показано, что существование в системе зародышей фаз с различными временами релаксации приводит к появлению дополнительной радиальной силы:

$$F_r = -\frac{\alpha}{r^4} \frac{2M(\dot{\phi}(0)^2 e^{2\alpha/r} + r^2 \dot{r}^2) + r^2 \partial U_a / \partial r}{M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3}}, \quad (11)$$

где $U_a(r,t)$ – независящая от скоростей часть потенциала электрокапиллярных сил, M – масса критического зародыша.



Скорости сжатия: $V = 2 \cdot 10^{-4}$ м/с (а, г), $V = 3 \cdot 10^{-4}$ м/с (б, д), $V = 4 \cdot 10^{-4}$ м/с (в, е)

Рисунок 3. – Распределение времен релаксации (а-в) и зависимость параметра эволюции от координаты r (г-е) при различных скоростях сжатия монослоя

В разделах 3.6-3.7 строится решение уравнений Эйлера-Лагранжа в виде $\vec{r} = \vec{r}_0 + \delta\vec{r}$, где $\delta\vec{r}(t)$ – отклонение от приближенного решения \vec{r}_0 , удовлетворяющего уравнению:

$$\frac{M\dot{\phi}_0^2}{4} \left(\frac{Me^{-\frac{2tV}{r_0}} \dot{r}_0^3}{4\tilde{p}Vr_0^4} + \frac{3}{2}r_0 \right)^2 = 0. \quad (12)$$

Приближенное решение \vec{r}_0 уравнения (12) находится в виде

$$r_0 = \left(\frac{1}{R_0^{2/3}} + \frac{4\tilde{p}}{M} \left(2R_0 e^{-2} Ei \left(\frac{2R_0}{R_0 - Vt} \right) - (R_0 - Vt) e^{\frac{2Vt}{R_0 - Vt}} \right) \right)^{-3/2}, \quad \phi_0 = const. \quad (13)$$

Система уравнений Якоби для отклонения $\delta\vec{r}(t)$ имеет вид

$$\left(2\tilde{p}V r_0^5 e^{2tV/r_0} - M\dot{r}_0^3\right) \frac{d^2\delta r}{dt^2} + \tilde{p}V r_0^3 e^{2tV/r_0} (2tV - 5r_0)\dot{r}_0 \frac{d\delta r}{dt} + \dot{r}_0^3 \frac{\partial^2 U_{1a}}{\partial r_0^2} \delta r = 0, \quad (14)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \delta\varphi(t) = 0, \quad \delta\varphi = C_1 + C_2 t; \quad (15)$$

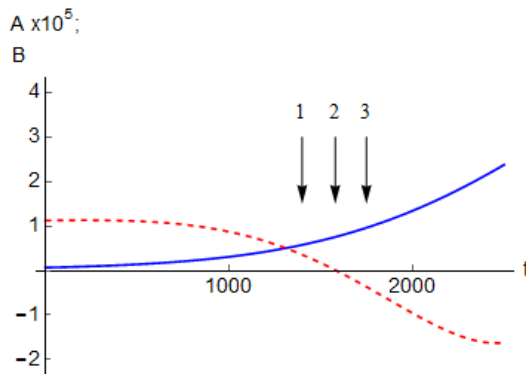
уравнение (14) решается численно. Анализ показал, что аналитическое решение r_0 уже является хорошим приближением. Кроме того, на основании результатов численного моделирования можно заключить, что решение является устойчивым при малых, но конечных возмущениях.

В разделе 3.8 рассмотрено уравнение Якоби в виде

$$\frac{\partial^2 \delta r}{\partial t^2} = -K_{\text{flag}} \delta r,$$

и получены аналитические выражения для флаговой кривизны K_{flag} в случае одного вмерени релаксации и для модельного распределения времен релаксации. Показано, что флаговая кривизна K_{flag} меняет знак в некоторый момент времени; это соответствует тому, что система переходит от устойчивых конфигураций к неустойчивым.

В главе 4 исследованы геометрические структуры финслерового пространства монослоя (6): индикатриса, дисторсия, вектор Картана и кривизна Бервальда. В разделах 4.1–4.3 установлено, что появление в монослое зародышей фаз с большими временами релаксации соответствует изменению знака параметра B метрической функции F и типа индикатрис (рисунок 4).



A – сплошная линия; B – пунктирная линия.

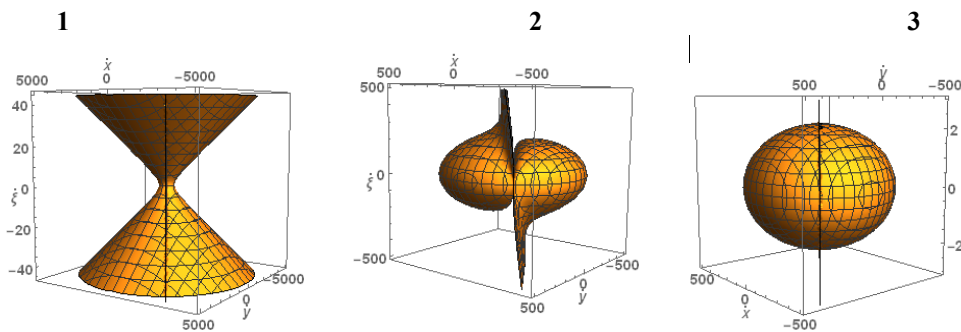


Рисунок 4. – Индикатрисы финслерового пространства сжимающегося монослоя в различные моменты времени

Поскольку появление зародышей фаз с большими временами релаксации происходит при высоких скоростях сжатия (см. рисунок 3), то чем больше скорость сжатия монослоя, тем больше отклонение финслерова пространства (6) от соответствующего риманова, последнее характеризуется метрической функцией

$$F_R^2(x^i, y^i) = B(r, t)\dot{\xi}^2 - C \frac{(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2)}{2}. \quad (16)$$

Вектор Картана и кривизна Бервальда обращаются в ноль для римановых пространств. В рассматриваемом случае сжимающегося монослоя эти величины отличны от нуля.

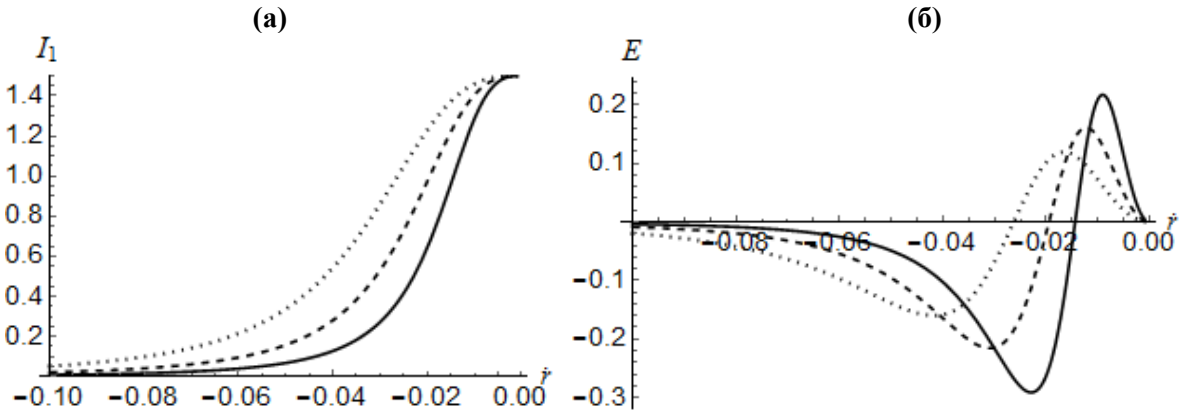
На рисунке 5 представлена зависимость вектора Картана

$$I_i = \frac{1}{2} g^{jk} \frac{\partial g_{jk}}{\partial y^i} = \begin{pmatrix} \frac{3A(2A\dot{\xi}^3 + 2B\dot{r}\dot{\xi}^2 - C\dot{r}^3)}{3A^2\dot{\xi}^4 + A(4B\dot{r}\dot{\xi}^3 - 6C\dot{r}^3\dot{\xi}) - 2BC\dot{r}^4} \\ \frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \frac{3A(2A\dot{\xi}^3 + 2B\dot{r}\dot{\xi}^2 - C\dot{r}^3)}{(3A^2\dot{\xi}^4 + A(4B\dot{r}\dot{\xi}^3 - 6C\dot{r}^3\dot{\xi}) - 2BC\dot{r}^4)} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_1 \\ -\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} I_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

и E -кривизны

$$E(u, v) := B_{ij}^m u^i v^j = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^i \partial y^j} \left[\frac{\partial G^m}{\partial y^m} \right] u^i v^j, \quad \text{при } u = (0, \dot{r}, 0), \quad v = (0, 0, r\dot{\phi}), \quad (18)$$

от скорости \dot{r} . Тензор $B_{jkl}^i = \frac{\partial^3 G^i}{\partial y^j \partial y^k \partial y^l}$ в (18) называется тензором кривизны Бервальда.



Время сжатия: $t = 0$ (сплошная), $t = 1580$ (штриховая), $t = 2500$ (пунктирная).

Рисунок 5. – Зависимость вектора Картана (а) и E -кривизны (б) от скорости \dot{r}

Кривизна меняет знак с минуса на плюс при уменьшении радиальной скорости $|\dot{r}|$ или при увеличении параметра $\dot{\xi}$. Малые значения $|\dot{r}|$ соответст-

вуют кристаллической фазе монослоя; а рост величины ξ – появлению зародышей фазы с размерами намного больше критического, что означает переход монослоя в кристаллическое состояние. Поэтому вид кривых на рисунке 5б свидетельствует о том, что E -кривизна существенно меняется в процессе фазового перехода.

Раздел 4.4 посвящен геометрическому моделированию важной и экспериментально измеряемой термодинамической характеристики – сжимаемости монослоя. С этой целью рассмотрено обобщенное уравнение непрерывности в финслеровом пространстве. Найдены зависимости между поверхностным давлением p , сжимаемостью κ и кривизной Бервальда B_{jkl}^i :

$$p = p_0 + \Delta p = \frac{N}{\pi r^2 \theta} + \Delta p, \quad \kappa = \kappa_0 \left(1 + \frac{\kappa_0}{\Delta \kappa}\right)^{-1} = \frac{\pi r^2 \theta}{N} \left(1 + \frac{\pi r^2 \theta}{N \Delta \kappa}\right)^{-1}, \quad (19)$$

где N , p_0 и κ_0 – число зародышей фаз, поверхностное давление и сжимаемость в приближении двумерного идеального газа, Δp и $\Delta \kappa$ – приращения давления и сжимаемости, обусловленные электрокапиллярными эффектами и определяемые соотношениями:

$$\Delta p = -\frac{\partial \Phi}{\partial W} = -\frac{1}{\theta \sigma_F (\beta^1 y^2 y^3 + \beta^2 y^3 y^1 + \beta^3 y^1 y^2)} \left(\alpha B_s - 3g^{ik} N_{jk}^j \frac{g_{il} y^l}{F^2} + \theta g^{ik} N_{ik}^j \frac{\partial H}{\partial y^j} \right), \quad (20)$$

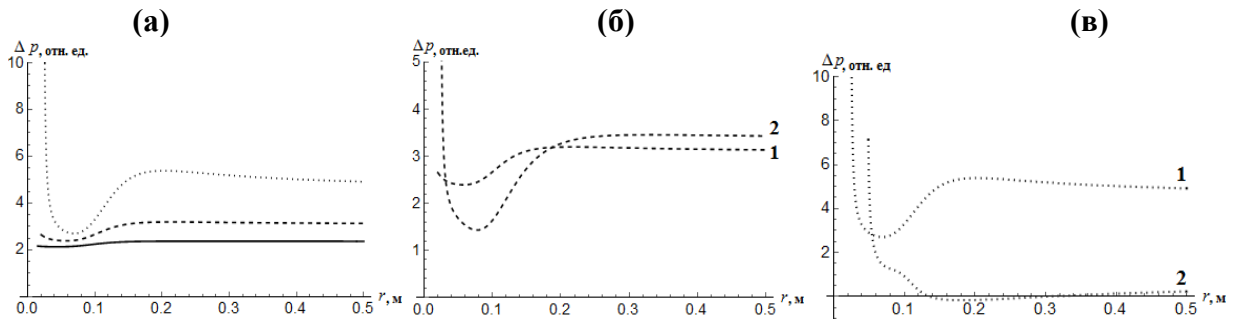
$$\Delta \kappa = \frac{1}{W} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial W^2} \right)^{-1} \approx -\frac{1}{2} \frac{\theta \sigma_F}{\alpha B_s} (\beta^1 y^2 y^3 + \beta^2 y^3 y^1 + \beta^3 y^1 y^2), \quad (21)$$

где α – феноменологическая постоянная, θ – обратная температура, H – внутренняя энергия,

$$W \equiv \frac{dV}{(ds)^3} = \sigma_F y^1 y^2 y^3, \quad \beta^l \equiv g^{ik} N_{ik}^l, \quad N_{jk}^i = \frac{\partial^2 G^i}{\partial y^j \partial y^k},$$

$$B_s = g^{ij} B_{ijm}^m, \quad H = \frac{C(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + F^2}{\xi^2} - \Lambda^2.$$

На рисунках 6 и 7 представлены приращения поверхностного давления $\Delta p(r)$ и соответствующие изотермы сжатия $p(r)$.



Скорость сжатия: $V = 1 \cdot 10^{-4}$ м/с (сплошная), $V = 2 \cdot 10^{-4}$ м/с (штриховая), $V = 3 \cdot 10^{-4}$ м/с (пунктирная); время релаксации: (а) $\xi = 1$; (б и в) $\xi = 1$ (кривая 1), $\xi = 2$ (кривая 2).

Рисунок 6. – Зависимость приращения поверхностного давления Δp от координаты r

Отмечаем, что повышение скорости сжатия приводит к нелинейному возрастанию поверхностного давления (см. рисунок 6а) и к появлению области горизонтального плато на изотерме (см. рисунок 7). Формирование зародышей фаз с размерами выше критического ($\xi > 1$) в условиях быстрого сжатия (см. рисунок 6в) сопровождается существенным изменением поведения кривой $\Delta p(r)$; в частности, в изотермах наблюдается несколько точек перегиба.

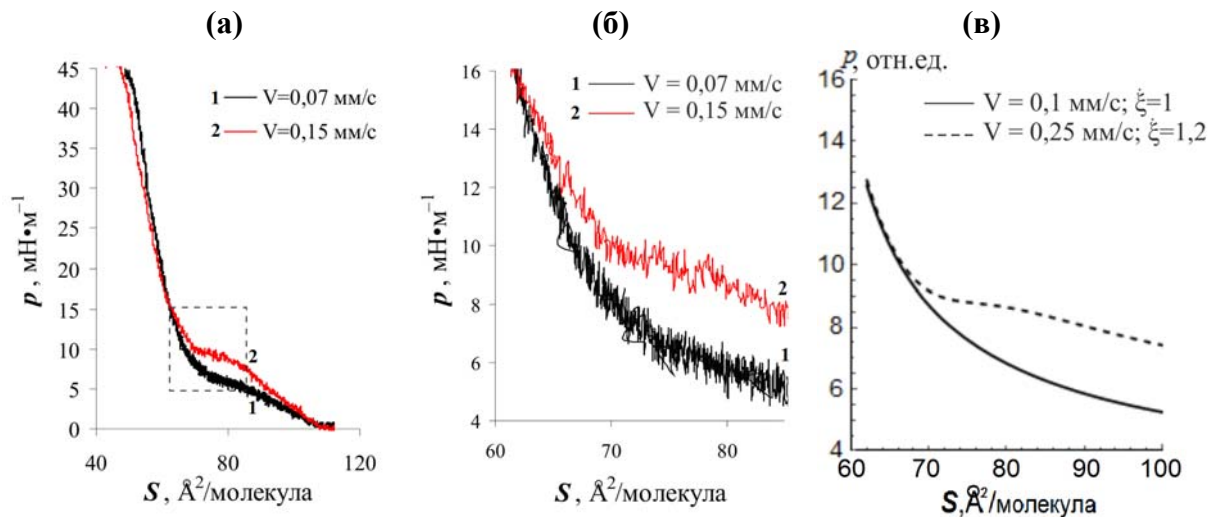
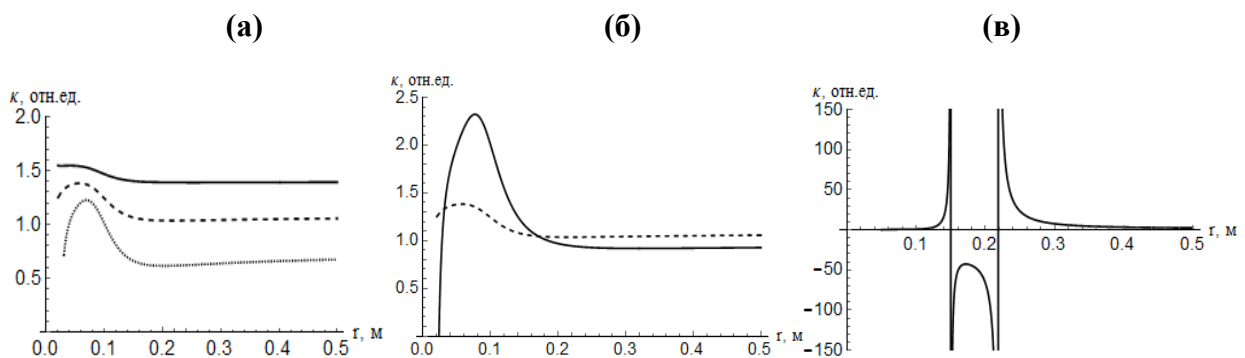


Рисунок 7. – Экспериментальные и теоретические изотермы при различных скоростях сжатия. (б) представляет фрагмент изотермы (а) в области фазового перехода

Как видно из сравнения рисунков 7б и 7в, поведение полученных теоретических кривых соответствует экспериментальным данным.

На рисунке 8 представлены теоретические зависимости сжимаемости при различных скоростях сжатия и временах релаксации зародышей фаз.



(а) $V = 1 \cdot 10^{-4}$ м/с (сплошная), $V = 2 \cdot 10^{-4}$ м/с (штриховая),
 $V = 3 \cdot 10^{-4}$ м/с (пунктирная); $\xi = 1$.

(б) $V = 2 \cdot 10^{-4}$ м/с; $\xi = 1$ (пунктирная), $\xi = 2$ (сплошная). (в) $V = 3 \cdot 10^{-4}$ м/с, $\xi = 2$.

Вертикальные линии на рисунке (в) соответствуют асимптотам функции.

Рисунок 8. – Зависимость сжимаемости монослоя от r

Отмечаем, что в условиях образования зародышей фаз с временами релаксации, близкими к критическому значению $\xi = 1$, увеличение скорости сжатия сопровождается уменьшением сжимаемости. Если образуются зародыши с большими временами релаксации $\xi > 1$, то при высоких скоростях сжатия могут возникать области с отрицательной сжимаемостью. Это обусловлено обращением производной $\partial^2\Phi/\partial W^2$ в нуль в некоторых точках.

В настоящее время надежных экспериментальных данных по измерению сжимаемости в области фазового перехода нет. Поэтому кривые на рисунках 8 можно рассматривать лишь как теоретические предсказания.

Неравенство $\partial p/\partial V < 0$, обеспечивая положительность сжимаемости κ , определяет термодинамическую устойчивость состояния вещества. При фазовых переходах обычно рассматривают достаточно медленное сжатие, при котором система близка к равновесному состоянию.

Однако, в условиях фазового перехода первого рода вещество переходит в метастабильное состояние, и возникновение отрицательной сжимаемости отражает неустойчивость системы по отношению к фазовому расслоению. В работах последних лет развиваются модели материалов ("mechanical metamaterials"), которые характеризуются фазовыми переходами с отрицательной сжимаемостью. Такие фазовые переходы возможны, если система дестабилизируется с энергией и скоростью, достаточными, чтобы преодолеть энергетический барьер нуклеации и достичь точек абсолютной неустойчивости вещества (так называемой линии спинодали). В условиях, когда сжатие монослоя с высокими скоростями ($V = 3 \cdot 10^{-4}$ м/с) приводит к быстрому образованию зародышей с размерами много больше критического (см. рисунок 3, в), состояние монослоя можно представить как аналог переохлажденной жидкости. Дальнейший переход из метастабильного в равновесное (кристаллическое) состояние будет характеризоваться отрицательной сжимаемостью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. На основе учета влияния электрокапиллярных эффектов на структуризацию сжатых двумерных монослоев Ленгмюра построен эффективный потенциал, который определяет суммарное взаимодействие молекул субфазы с молекулами монослоя; установлено наличие минимума в этом потенциале, что может приводить к возникновению локальной структуры в монослое; положение и глубина минимума зависят от скорости сжатия монослоя [4, 6].

2. На основе анализа процессов гетерогенной нуклеации в монослое в процессе фазового перехода жидкость-кристаллическое состояние предложена специальная параметризация, учитывающая возникновение зародышей фаз с различными временами релаксации; это позволило выполнить финслерову геометризацию взаимодействия в монослое и построить лагранжиан и финслерову метрическую функцию конфигурационного пространства системы [4, 6].

3. Получены обобщенные уравнения Эйлера-Лагранжа в финслеровом пространстве монослоя и проведен численный анализ динамики фазового перехода жидкость-кристаллическое состояние; установлено, что при увеличении скорости сжатия монослоя период нуклеации сужается, а доля зародышей кристаллической фазы с размерами много больше критического возрастает [4, 5].

4. В рамках финслер-лагранжевого формализма исследована динамика фазового перехода при малых скоростях сжатия; показано, что существование зародышей фаз с различными временами релаксации приводит к появлению эффективной радиальной силы; получены аналитические выражения для геодезических в финслеровом пространстве в случае одного времени релаксации и при модельном распределении времен релаксации [1, 4, 5].

5. Проведен анализ геометрических объектов финслерова пространства монослоя: индикатрисы, дисторсии, кривизны Бервальда; установлено, что тип индикатрисы, дисторсия, вектор Картана и средняя кривизна Бервальда существенно меняются на этапе фазового перехода; вклад финслеровых поправок увеличивается с ростом скорости сжатия монослоя [2, 7].

6. Получены приближенные аналитические выражения для поверхностного давления и сжимаемости монослоя как функций кривизны Бервальда; показана согласованность теоретических зависимостей с экспериментальными данными; установлено, что скорость сжатия и времена релаксации зародышей фаз существенно влияют на поведение сжимаемости и поверхност-

ного давления: повышение скорости сжатия приводит к появлению горизонтального плато на изотерме и повышению сжимаемости, а наличие зародышей фаз с большими временами релаксации может приводить к появлению отрицательной сжимаемости монослоя [3, 7].

Рекомендации по практическому использованию результатов

В связи с перспективами создания молекулярных и клеточных нанобиосенсоров, использующих в качестве чувствительного покрытия композитные пленки Ленгмюра-Блоджетт, практическое значение имеет теоретическое моделирование таких систем. Полученные в диссертационной работе результаты могут быть использованы при создании сенсорных структур.

Развитый в диссертации теоретический подход может быть применен в различных задачах биофизики. В частности, ленгмюровские монослои являются хорошими моделями биологических мембран. Результаты моделирования могут найти применение при изучении поведения мембран с различным липидным составом и рафтовой структурой. Полученные в работе зависимости изотерм от скорости сжатия могут быть использованы для объяснения механизма функционирования мембран альвеол в условиях быстрого сжатия-растяжения.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы в исследованиях, ведущихся в Белорусском государственном университете, Институте химии новых материалов НАН Беларуси и других организациях, в которых используется технология Ленгмюра-Блоджетт.

Полученные в диссертации результаты и развитые методы могут использоваться в учебных курсах по дисциплинам биофизики, физики конденсированного состояния, в курсе современных проблем физики для магистрантов.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых журналах:

1. Neagu, M. Jet theoretical Yang-Mills energy in the geometric dynamics of two dimensional monolayer / M. Neagu, N.G. Krylova, H.V. Grushevskaya // *J. Math. Phys.* – 2013. – Vol. 54. – Paper 031508. 14 p.
2. On the Berwald-Lagrange scalar curvature in the structuring process of the LB-monolayer / V. Balan, G. Grushevskaya, N. Krylova, M. Neagu, A. Oana // *Applied Sciences.* – 2013. – Vol. 15. – P. 30–42.
3. Balan, V. Finsler geometry approach to thermodynamics of first order phase transitions in monolayers / V. Balan, H. Grushevskaya, N. Krylova // *Differential Geometry - Dynamical Systems* – 2015. – Vol. 17. – P. 24–31.
4. Multiple-relaxation-time Finsler-Lagrange dynamics in a compressed Langmuir monolayer / V. Balan, H. Grushevskaya, N. Krylova, M. Neagu // *J. Nonlin. Phen. in Complex Sys.* – 2016. – Vol. 19, no. 3. – P. 223–253.
5. Крылова, Н.Г. Динамика фазовых переходов 1-го рода в финслеровом конфигурационном пространстве ленгмюровского монослоя / Н.Г. Крылова, Г.В. Грушевская, В.М. Редьков // *Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук.* – 2017. – № 3. – С. 66–77.
6. Крылова, Н.Г. Финслерова геометризация электрокапиллярного взаимодействия в ленгмюровских монослоях / Н.Г. Крылова // *Веснік Брэсцкага ўніверсітэта.* – 2017. – № 2. – С. 27–39.
7. Крылова, Н.Г. Геометрическое моделирование динамики сжимаемости ленгмюровского монослоя / Н.Г. Крылова, Г.В. Грушевская // *Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук.* – 2018. – Т.54, № 1. – С. 84–96.

Сборник научных трудов:

8. Грушевская, Г.В. Эффекты финслеровой геометрии в физике поверхностных явлений: случай монослойных систем / Г.В. Грушевская, Н.Г. Крылова // *Гиперкомплексные числа в геометрии и физике.* – 2011. – Т. 8, № 1 (15). – С. 128–146.

Материалы научных конференций:

9. Modeling of the behavior and statistical analysis of compressibility in the process of Langmuir monolayer structurization / H.V. Grushevskaya, G.G. Krylov, N.G. Krylova, I.V. Lipnevich // *IOP Journal of Physics: Conference Series.* – 2015. – Vol. 643. – Paper 012015. 6 p.

10. Grushevskaya, H.V. The distortion and S-curvature of Langmuir monolayer space under the action of electro-capillary forces / H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova // *Methods of non-Euclidean geometry in physics and mathematics: Proceedings of the IX Int. Conf., Minsk, 27 – 30 Nov. 2015* / NAS of Belarus; eds.: Yu. Kurochkin, V. Red'kov. – Minsk, 2015. – P. 168–175.

11. The geometry of jet Hamiltonians in Langmuir-Blodgett films / V. Balan, M. Neagu, A. Oana, N.G. Krylova, H.V. Grushevskaya // *Methods of non-Euclidean geometry in physics and mathematics: proceedings of the IX Int. Conf., Minsk, 27 – 30 Nov. 2015* / NAS of Belarus; eds.: Yu. Kurochkin, V. Red'kov. – Minsk, 2015. – P. 150–157.

12. Крылова, Н.Г. Динамика фазового перехода 1-го рода в финслеровом конфигурационном пространстве монослоя Ленгмюра / Н.Г. Крылова // VI Конгресс физиков Беларуси (20-23 ноября 2017): Сборник научных трудов. / редкол.: С.Я. Килин (гл.ред.) [и др.] – Минск: Институт физики НАН Беларуси, 2017. – С. 87–89.

Тезисы докладов:

13. Grushevskaya, H.V. A finsler geometrization of interactions at structure formation in Langmuir-Blodgett monolayers / H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova // *Non-euclidean geometry and its applications: abstracts book of 7th Bolyai-Gaus Lobachevsky conference series, 5 – 10 July 2010.* – Cluj-Napoca, 2010. – P. 29.

14. Krylova, H.V. A geometrical approach to simulation for supramolecular complex formation processes in monolayer / H.V. Krylova, N. Krylova // *Finsler Extensions of Relativity Theory: proceedings of the VII Int. Conf. 29 August – 4 Sept. 2011* / Transilvania University. – Braşov, 2011. – P. 12.

15. Grushevskaya, H.V. Application of Finsler geometry to instanton-like process of LB-nanostructures emerging in monolayer / H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova // *Non-Euclidean geometry in modern physics and mathematics: proceedings of VIII Int. Bolyai - Gauss - Lobachevsky conference series, 22 – 25 May 2012* / Institute of electronic physics; ed.: A.M. Zvilopulo. – Uzhgorod, 2012. – P. 44.

16. The Finsler geometry induced by surface phenomena on interphase boundary with amphiphilic molecular layer / V. Balan, H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova, A. Oana // *Finsler extension of relativity theory: proceedings of VII Int. conf., 25 June –1 July 2012* / MSTU, Research Institute of Hypercomplex systems in Geometry and Physics – Moscow, Frjazino, 2012. – P. 91–92.

17. Neagu, M. Jet theoretical Yang – Mills energy in the geometric dynamics of 2D-LB-monolayer / M. Neagu, N. Krylova, H. Grushevskaya // *Finsler extension of relativity theory: proceedings of VII Int. conf., 25 June –1 July 2012* /

MSTU, Research Institute of Hypercomplex systems in Geometry and Physics – Moscow, Frjazino, 2012. – P. 73.

18. Berwald-Lagrange scalar curvature in the structure process of LB-monolayer / N. Krylova, A. Oana, V. Balan, G. Grushevskaya, M. Neagu // Foundations & Advances in Nonlinear Science: programme and book of abstracts of 16-th Int. Conf. - School, 24 – 28 Sept. 2012 / Belarusian state university; eds.: A.L.Tolstik, L.F.Babichev. – Minsk, 2012. – P. 47.

19. Sectional Berwald curvature in 2D-phase transition for Langmuir monolayer / G. Grushevskaya, N. Krylova, V. Balan, M. Neagu, A. Oana // Finsler extension of relativity theory: book of abstracts of Joint event of IX-th Int. conf. and Colloquium on differential geometry and its applications, 26 – 30 August 2013 / University of Debrecen, Institute of Mathematics. – Debrecen, 2013. – P. 19.

20. Finsler geometry approach to thermodynamics of first order phase transitions in monolayer / H. Grushevskaya, N. Krylova, G. Krylov, I. Lipnevich // Finsler extensions of relativity theory: book of abstracts of X-th Int. Conf., 18 – 23 August 2014 / Transilvania University. – Brasov, 2014. – P. 13–14.

21. Nonlinear Finsler-Lagrange dynamics leading to the relaxation times distribution in the compressed Langmuir monolayer / V. Balan, H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova, M. Neagu // Physical and mathematical problems of advanced technology development: book of abstracts of Int. Sci. Conf., 17 – 19 Nov. 2014 / Bauman Moscow State Technical University. – Moscow, 2014. – P. 59–60.

22. Grushevskaya, H. Jacobi dynamics in a first order phase transition at interface boundary / H. Grushevskaya, N. Krylova // Foundations & Advances in Nonlinear Science: programme and book of abstracts of 17-th Int.Conf. – School, 29 Sept. – 3 Oct. 2014 / Belarusian state university, St.-Petersburg Polytechnic University; eds.: A.L. Tolstik, L.F. Babichev, D.W. Serow. – Minsk, 2014. – P. 49–50.

23. Modeling of the behavior and statistical analysis of compressibility in the process of Langmuir monolayer structurization / H.V. Grushevskaya, G.G. Krylov, N.G. Krylova, I.V. Lipnevich // Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures: book of abstracts of 2nd Int. School – Conf., 6 – 8 April 2015 / St.-Petersburg Academic University, St.-Petersburg Polytechnic University; eds.: Zh.I. Alferov, A.E. Zhukov, V.V. Korenev. – St.-Petersburg, 2015. – P. 58–59.

24. Multi-time geometrodynamics of compressed Langmuir monolayer: the Finsler - Lagrange approach / V. Balan, G. Grushevskaya, N. Krylova, M. Neagu // Differential Geometry and Dynamical Systems: boos of abstacts of IX

Int. Conf., 8 – 11 Oct. 2015 / University Politecnica of Bucharest. – Bucharest, 2015. – P. 6.

25. Grushevskaya, H. Pseudo-Finsler geometry modeling of Langmuir monolayer with edge / H. Grushevskaya, N. Krylova, G. Krylov // Differential Geometry and Dynamical Systems: boos of abstacks of IX Int. Conf., 8 – 11 Oct. 2015 / University Politecnica of Bucharest. – Bucharest, 2015. – P. 3.

26. Grushevskaya, H.V. Mathematical modelling of electrocapillarity in compressing monolayers: application of Finsler – Lagrange approach to two-dimensional phase transition of the first order / H.V. Grushevskaya, N.G. Krylova, I.V. Lipnevich // Foundations & Advances in Nonlinear Science: book of abstracts of 18-th Int. Conf. – School, 27 Sept. – 1 Oct. 2016 / Belarusian state university, St.-Petersburg Polytechnic University; eds.: A.L. Tolstik, G.G. Krylov, D.W. Serow. – Minsk, 2016. – P. 50.

27. Крылова, Н.Г. Дисторсия пространства сжатого монослоя под действием электрокапиллярных сил / Н.Г. Крылова, Г.В. Грушевская // Гравитация, космология и механика сплошных сред: сборник тезисов Междунар. конф., 3 – 4 марта 2016 г. / МГТУ им. Н.Э.Баумана – Москва, 2016. – С. 4.

28. Крылова, Н.Г. Влияние границы на структуризацию в двумерной псевдофинслеровой модели ленгмюровского монослоя / Н.Г. Крылова, Г.В. Грушевская, Г.Г. Крылов // Гравитация, космология и механика сплошных сред: сборник тезисов Междунар. конф., 3 – 4 марта 2016 г. / МГТУ им. Н.Э.Баумана – Москва, 2016. – С. 3.

РЕЗЮМЕ

Крылова Нина Георгиевна

**Геометрическое моделирование динамики ленгмюровского монослоя
на основе Лагранж-Финслерова формализма**

Ключевые слова: ленгмюровский монослой, фазовый переход первого рода, динамика Эйлера-Лагранжа, пространство Финслера, распределение времен релаксации, сжимаемость монослоя.

Цель работы: развитие геометрического подхода Финслера-Лагранжа для моделирования фазовых переходов 1-го рода жидкость-кристаллическое состояние в ленгмюровском монослое с учетом зависящих от скорости сжатия электрокапиллярных явлений.

Методы исследования: дифференциально-геометрические методы, численные методы решения дифференциальных уравнений.

Полученные результаты и их новизна. В диссертации впервые рассмотрено влияние электрокапиллярных явлений и скорости сжатия на формирование ленгмюровских монослоев. Построен эффективный потенциал, который определяет суммарное взаимодействие молекул субфазы с молекулами монослоя; установлено наличие минимума в потенциале, который приводит к возникновению локальной структуры в монослое, положение и глубина минимума зависят от скорости сжатия. На основе анализа процессов гетерогенной нуклеации в монослое в процессе фазового перехода жидкость-кристаллическое состояние предложена специальная параметризация, учитывающая возникновение зародышей фаз с различными временами релаксации и позволившая выполнить финслерову геометризацию взаимодействия в монослое; построены лагранжиан и финслерова метрическая функция конфигурационного пространства системы. На основе этой геометризации выполнено моделирование динамики фазового перехода жидкость-кристаллическое состояние с учетом распределения зародышей фаз по временам релаксации. Установлено, что при увеличении скорости сжатия монослоя период нуклеации сужается, а доля зародышей кристаллической фазы с размерами много больше критического возрастает. Исследованы геометрические объекты финслерова пространства: индикатриса, дисторсия, кривизна Бервальда; установлено, что они существенно меняются на этапе фазового перехода; вклад финслеровых поправок увеличивается с ростом скорости сжатия монослоя; получены аналитические выражения для поверхностного давления и сжимаемости монослоя, которые зависят от скорости сжатия, заряда молекул, времен релаксации зародышей фаз.

Рекомендации по использованию и область применения. Полученные результаты могут найти широкое применение в наносенсорике при разработке чувствительных покрытий на основе композитных пленок Ленгмюра-Блоджетт; и в биофизике при исследовании биологических мембран с различным липидным составом в условиях быстрого сжатия или растяжения.

РЭЗІЮМЕ

Крылова Ніна Георгіеўна

Геаметрычнае мадэляванне дынамікі лэнгмюраўскага монаслою на падставе Лагранж-Фінслеравага фармалізму

Ключавыя словы: лэнгмюраўскі монаслоу, фазавы пераход першага роду, дынаміка Эйлера-Лагранжа, прастора Фінслера, размеркаванне часу рэлаксацыі, сціскальнасць монаслою.

Мэта працы: развіццё геаметрычнага падыходу Фінслера-Лагранжа для мадэлявання фазавых пераходаў 1-га роду вадкасць-крышталічны стан у лэнгмюраўскім монаслоі з улікам залежачых ад хуткасці сціскання электракапілярных з'яў.

Метады даследавання: дыферэнцыяльна-геаметрычныя метады, лікавыя метады рашэння дыферэнцыяльных раўнанняў.

Атрыманя вынікі і іх навізна. У дысертацыі ўпершыню разгледжаны ўплыў электракапілярных з'яў і хуткасці сціскання на фарміраванне лэнгмюраўскіх монаслаеў. Пабудаваны эфектыўны патэнцыял, які вызначае сумарная ўзаемадзеянне малекул субфазы з малекуламі монаслою; вызначана наяўнасць мінімуму ў патэнцыяле, што прыводзіць да ўзнікнення лакальнай структуры ў монаслоі, становішча і глыбіня мінімуму залежаць ад хуткасці сціскання. На падставе аналізу працэсаў гетэрагеннай нуклеацыі ў монаслоі ў працэсе фазавога пераходу вадкасць-крышталічны стан прапанавана спецыяльная параметрызацыя, якая ўлічвае ўзнікненне зародкаў фаз з розным часам рэлаксацыі і дазваляе выканаць фінслераву геаметрызацыю ўзаемадзеяння ў монаслоі; пабудаваны лагранжыян і фінслерава метрычная функцыя канфігурацыйнай прасторы сістэмы. На аснове гэтай геаметрызацыі выканана мадэляванне дынамікі фазавога пераходу вадкасць-крышталічны стан з улікам размеркавання зародкаў фаз па часу рэлаксацыі. Выяўлена, што пры павелічэнні хуткасці сціскання монаслою перыяд нуклеацыі памяншаецца, а доля зародкаў крышталічнай фазы з памерамі, якія шмат большыя крытычнага, ўзрастае. Даследаваны геаметрычныя аб'екты фінслеравай прасторы: індикатрыса, дысторсія, крывізна Бервальда; выяўлена, што яны істотна змяняюцца пад час фазавога пераходу; уклад фінслеравых паправак павялічваецца з ростам хуткасці сціскання монаслою; атрыманы аналітычныя выразы для паверхневага ціску і сціскальнасці монаслою, якія залежаць ад хуткасці сціскання, зараду малекул, часу рэлаксацыі зародкаў фаз.

Вобласць прымянення і рэкамендацыі па выкарыстанню. Атрыманя вынікі могуць знайсці шырокае прымяненне ў нанасэнсорыцы пры распрацоўцы адчувальных пакрыццяў на аснове кампазітных плёнак Лэнгмюра-Бладжэты; а таксама ў біяфізіцы пры даследаванні біялагічных мембран з розным ліпідным складам ва ўмовах хуткага сціскання або расцягвання.

SUMMARY

Krylova Nina Georgievna

Geometrical modeling of the Langmuir monolayer based on Lagrange-Finsler formalism

Key words: Langmuir monolayer, first-order phase transition, Euler-Lagrange dynamics, Finsler space, relaxation times distribution, monolayer compressibility.

The goal of the research is to develop Finsler-Lagrange geometrical approach to modeling the first-order phase transition from liquid to crystalline state in Langmuir monolayer, taking into account the electrocapillary phenomena depending on compression rate.

Methods of investigations: differential geometry methods, methods of numerical simulation of differential equations.

Obtained results and their novelty. For the first time the influence of electrocapillary phenomena and compression rate on Langmuir monolayer formation has been considered in the dissertation. An effective potential which determines total interaction of monolayer molecules with subphase has been constructed; it has been revealed a potential minimum that leads to appearing a local structure in the monolayer; a position and depth of the minimum depend on monolayer compression rate. Analysis of monolayer heterogeneous nucleation processes during liquid-crystal first order phase transition allows to propose a special parametrization which takes into account the formation of phase nuclei with different relaxation times and to perform Finsler geometrization of the interactions in the monolayer; the Lagrangian and Finsler metric function of the system configuration space have been constructed. Based on this geometrization, the dynamics of the liquid-crystal phase transition has been modelled taking into account the relaxation times distribution of phase nuclei. It has been established that nucleation period narrows and a fraction of the crystal phase nuclei with a size much larger than critical one increases at increase of the compression rate. Geometrical objects of Finsler space: indicatrix, distortion, Berwald curvature, has been studied; it has been found out that they change significantly during the phase transition; Finsler corrections yield increases with increase in the monolayer compression rate; the analytical expressions which depend on monolayer compression rate, molecular charge and phase nuclei relaxation times has been obtained for the surface pressure and monolayer compressibility.

Recommendations for use and area of application. The results of dissertation can find wide range of applications in nanosensorics at development of sensitivity coatings based on composite Langmuir-Blodgett films; as well as, in biophysics at studying of biological membrane under the condition of rapid compression or expansion, depending on membrane lipid content.

КРЫЛОВА
Нина Георгиевна

**ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИНАМИКИ ЛЕНГМЮРОВСКОГО МОНОСЛОЯ
НА ОСНОВЕ ЛАГРАНЖ-ФИНСЛЕРОВА ФОРМАЛИЗМА**

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Подписано в печать «23» апреля 2018 г. Формат 60×90 1/16.
Бумага офисная. Печать офсетная. Печ. л. 1.5
Учетн. изд. л. 1.2 Тираж 60 экз. Заказ № 3

ГНУ «Институт физики им. Б.И. Степанова
Национальной академии наук Беларуси»
220072, Минск, пр. Независимости, 68.
Отпечатано на ризографе ГНУ «Институт физики
им. Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси»