

УЧРЕЖДЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

УДК 531.19

Бильданов Эльдар Эмирович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ РЕШЕТОЧНЫХ
СИСТЕМ С КОНКУРИРУЮЩИМИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Минск 2024

Работа выполнена на кафедре механики и конструирования учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет»

Научный руководитель

Грода Ярослав Геннадьевич,
кандидат физико-математических наук,
доцент, ведущий научный сотрудник ООО
«Бел Хуавей Технолоджис»

Официальные оппоненты:

Феранчук Илья Давыдович,
Доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
кафедры теоретической физики и
астрофизики БГУ
Гринчук Павел Семенович,
Доктор физико-математических наук, член-
корреспондент НАН Беларуси, заведующий
отделением теплофизики ИТМО НАН
Беларуси

Оппонирующая организация

ГО «НПЦ НАН Беларуси по
материаловедению»

Защита состоится 6 марта 2024 года в 16 ч. 30 мин. на заседании совета по защите диссертаций Д 01.05.02 при Институте физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси по адресу: 220072, г. Минск, пр. Независимости, 68-2, тел.: 284-15-59, e-mail: vyblyi@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке имени Якуба Коласа Национальной академии наук Беларуси. Автореферат разослан « 5 » февраля 2024 г.

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



Ю. П. Выблый

ВВЕДЕНИЕ

Изучение процессов самоорганизации и самосборки в различных физических системах представляет большой интерес в силу нетривиальных особенностей их поведения. В качестве элементов таких систем выступают надмолекулярные образования с молекулярной массой от единиц до тысяч килодальтонов ($1 \text{ Да (дальтон)} = 1 \text{ а.е.м.}$), что приводит к малым скоростям их теплового движения и достаточно большим, по молекулярным масштабам, характерным временам протекания процессов в них. Примерами таких систем являются различные растворы белковых молекул, глины и грунтовые взвеси, экосистемы и многие другие.

Во всех указанных системах взаимодействие между их структурными элементами носит весьма сложный характер и, несмотря на достаточно большие размеры этих элементов по сравнению с молекулярными, может оставаться несущественно большим тепловой энергии $k_B T$. Последний факт обуславливает богатые возможности для разнообразных фазовых переходов при комнатных температурах ($T \sim 290 \text{ K}$).

Необходимость понимания процессов, происходящих в системах описанных выше видов, возможности предсказания их поведения в различных условиях, отслеживания динамики и эволюции, а также управления свойствами таких систем требует разработки соответствующих методов их теоретического описания и статистического моделирования. В принципиальном плане методы исследования молекулярных систем хорошо разработаны, однако большие массы частиц и своеобразие межчастичным взаимодействий приводят к необходимости существенной модификации уже известных подходов.

К настоящему времени считается установленным, что образование кластерных фаз, например, в биологических системах является следствием конкурирующих межчастичных взаимодействий: ван-дер-ваальсовского притяжения на малых расстояниях и кулоновского электростатического отталкивания на больших. Это позволяет называть такие системы SALR-системами (SALR – Short rang Attraction and Long range Repulsion).

Использование решеточных моделей является одним из предпочтительных подходов при исследовании процессов в SALR-системах поскольку такие модели допускают достаточно простое и интуитивно понятное моделирование по методу Монте-Карло как их равновесных свойств, так и протекающих в них неравновесных процессов. Методика такого подхода позволяет изучать свойства решеточных моделей при произвольных термодинамических условиях.

В представленной диссертационной работе исследованы характеристики двумерных решеточных систем с конкурирующими взаимодействиями. Разработаны алгоритмы численного моделирования их эволюции. Получены и проанализированы условия образования устойчивых ламеллярных (полосчатых) структур, возникающих при наличии гексагональных ограничений, а также изучены термодинамические свойства этих структур.

Обнаружен и интерпретирован эффект аномальной адсорбции в двумерных системах вызванных образованием кластеров частиц вблизи линии осаждения на инертную границу. Определены временные масштабы релаксационных процессов в исследуемых системах, обнаружены и изучены эффекты критического замедления вызванные самоупорядочиванием системы, а также эффекты быстрой концентрационной и энергетической самосборки, обусловленные наличием различных типов релаксации как числа частиц, так и внутренней энергии системы с конкурирующими взаимодействиями.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с крупными научными программами (проектами), темами. Результаты исследований, проведенных в диссертации, соответствуют научным направлениям кафедры механики и конструирования УО «Белорусский государственный технологический университет» и использовались при выполнении международного научного проекта CONIN «Effects of confinement on inhomogeneous systems» («Эффекты ограничений в неоднородных системах») программы HORIZON-2020, а также следующих научных тем и хоздоговоров:

1. ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограммы «Материаловедение и технологии материалов», задание 1.22 «Влияние несовершенства структуры твердых тел и их поверхностей на термодинамические и диффузионные характеристики и эффекты памяти», № ГР 20160343, 2016-2018 гг.

2. ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограммы «Материаловедение и технологии материалов», задание 2.30 «Равновесные и кинетические характеристики наноструктурных и керамических материалов при наличии ионных и электронных носителей заряда», № ГР 20160424, 2016-2018 гг.

3. ГПНИ «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма «Материаловедение и технологии материалов», задание 1.63 «Термодинамические, структурные и транспортные характеристики систем с конкурирующими взаимодействиями», № ГР 20192329, 2019-2020 гг.

4. Договор с Научно-исследовательским учреждением «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета № 209/103 от 13.09.2018 г. «Равновесные свойства систем с конкурирующим взаимодействием», № ГР 20181841, 2018 г.

5. Договор с Научно-исследовательским учреждением «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета № 21/408 от 15.09.2021 г. «Равновесные и транспортные свойства двух-

уровневых решеточных систем с неортогональной геометрией», № ГР 20213650, 2021 г.

6. Договор с Научно-исследовательским учреждением «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета № 22/415 от 30.09.2021 г. «Равновесные свойства систем заряженных частиц на поверхностях твердых тел», № ГР 20221741, 2022 г.

Цели и задачи исследований. Целью исследования является разработка теоретических основ статистико-механического анализа и методов моделирования равновесных свойств и процессов релаксации к равновесному состоянию систем с конкурирующими взаимодействиями. Для достижения этой цели к выполнению поставлены следующие задачи:

- 1) разработать модели для изучения равновесных свойств однородных и неоднородных (с пространственным ограничением) самоорганизующихся систем с конкурирующими взаимодействиями;
- 2) проанализировать равновесные и структурные характеристики замкнутых SALR-систем в гексагональном окружении;
- 3) изучить явление адсорбции SALR-частиц на взаимодействующую инертную линейную границу в рамках решеточной модели полубесконечной системы;
- 4) разработать модель для изучения особенностей эволюции SALR-системы в рамках процесса адсорбции/десорбции монослоя частиц на плоскую поверхность;
- 5) определить характеристические времена концентрационной и энергетической релаксации SALR-системы и проанализировать ее особенности перехода из начального произвольного состояния к равновесному.

Объектом исследования являются самоорганизующиеся системы с конкурирующим взаимодействием, решеточные модели для изучения равновесных, структурных и кинетических характеристик, и сами эти характеристики определяют предмет исследования.

Научная новизна вытекает из разработки уникальных моделей кластер-образующих систем с конкурирующим взаимодействием при наличии и отсутствии конфигурационных ограничений, а также установлении условий образования их структурных и эволюционных особенностей.

В диссертации впервые:

- 1) определены термодинамические условия образования концентрических, ламеллярных и спиральных структур в системах конечных размеров;
- 2) обнаружен и исследован эффект аномальной двумерной адсорбции SALR-частиц, взаимодействующих с линейной инертной подложкой;

3) установлены и исследованы различные типы релаксации концентрации и внутренней энергии SALR-системы к равновесному состоянию.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту.

1. Решеточные модели пригодные для изучения явления адсорбции на инертной линейной границе в двумерных системах с конкурирующими взаимодействиями, а также для изучения кинетики адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями, образующих монослой на инертной плоской поверхности в трехмерных системах и т. д.

2. Условия образования и способы управления ламеллярными, концентрическими и спиральными структурами в системе с конкурирующими взаимодействиями при наличии пространственных ограничений.

3. Эффект аномальной адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями на линейную инертную границу.

4. Особенности эволюции концентрации числа частиц и внутренней энергии системы частиц с конкурирующими взаимодействиями при ее переходе из начального произвольного состояния в равновесное.

Личный вклад соискателя. Все основные результаты, приводимые в диссертационной работе, получены автором лично. Главные направления исследований заданы научными руководителями: доктором физико-математических наук, профессором Вихренко В. С. и кандидатом физико-математических наук, доцентом Грода Я. Г.

Соавторы статей профессор Вихренко В.С., доцент Грода Я. Г., профессор Алина Цях и доктор философии Якуб Пекальский участвовали в постановке задач, выборе и анализе методов их решения, а также в обсуждении полученных результатов.

Апробация результатов диссертации. Включенные в диссертацию результаты были представлены на 83–86 ежегодных научно-технических конференциях профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием) УО «БГТУ» (2019–2021 гг.); симпозиуме сотрудников и гостей институтов физической и органической химии Польской академии наук (Варшава, Польша, январь 2019); III и IV конференциях участников проекта CO-NIN (Львов, Украина, июль 2019; Сероцк, Польша, июль 2022); XXVII International Seminar nonlinear phenomena in complex systems, Session VI: Mathematics and information technologies (Minsk, 2020); VI республиканской научно-технической конференции «Новые функциональные материалы, современные технологии и методы исследования» (Гомель, 2020).

Опубликованность результатов. По теме диссертации опубликовано 10 научных работ, среди которых в рецензируемых научных периодических изданиях, включенных в перечень ВАК, 3 статьи объемом 38 страниц (2,33 авторских листа), 1 статья в рецензируемом научно-периодическом издании и 6 тезисов докладов на международных и республиканских научных конференциях. Общий объем опубликованных материалов составляет 56 страниц (3,43 авторских листа).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, общей характеристики работы, четырех глав, заключения, списка литературы. Полный объем диссертации составляет 101 страницу, из них 42 иллюстрации занимает 14 страниц, 1 таблица – 1 страницу. Список литературы содержит 99 наименований на 8 страницах, из них 10 наименований составляют список публикаций соискателя.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Первая глава содержит обзор литературы по теме диссертации. В ней кратко описаны классы самоорганизующихся систем, методы их исследования, основные методы анализа равновесных и динамических характеристик SALR-систем в рамках решеточной модели, методы компьютерного моделирования равновесных свойств, а также процесса релаксации к равновесному состоянию.

Вторая глава посвящена исследованию результатов моделирования релаксации двумерной SALR-системы при наличии пространственного ограничения в виде замкнутого шестиугольника. На основе результатов, полученных благодаря моделированию по методу Монте-Карло, получены равновесные характеристики данной системы, такие как изотермы концентрации, теплоемкости, а также их флуктуации: термодинамический потенциал и удельная теплоемкость. Исследования проводились для модели двумерного решеточного флюида. Требуемые физические величины усреднялись по достаточному, для избегания статистической погрешности, числу независимых испытаний.

Гамильтониан для рассматриваемой системы имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{x}'} \hat{\rho}(\mathbf{x}) V^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\rho}(\mathbf{x}') - \sum_{\mathbf{x}} \mu^* \hat{\rho}(\mathbf{x}) + \sum_{\mathbf{x}_b} h^* \hat{\rho}(\mathbf{x}_b) \quad (1)$$

где $\hat{\rho}(\mathbf{x}) = 1$ или 0 – число заполнения, если узел решетки $\mathbf{x}$ занят частицей или вакантен, соответственно;

V^* – энергия взаимодействия;

μ^* – химический потенциал;

h^* – энергия взаимодействия частицы, расположенной в соседнем с границей узле, с самой границей;

$\mathbf{x}_b$ – радиус-векторы граничных узлов.

Энергия взаимодействия между занятыми узлами x и $x+\Delta x$ задается в следующем виде:

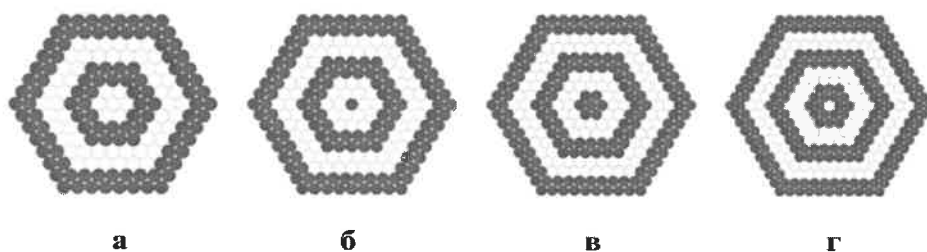
$$V^*(\Delta x) = \begin{cases} J_1^* & \text{для } |x - x'|=1; \\ J_3^* & \text{для } |x - x'|=2; \\ 0 & \text{для всех остальных,} \end{cases} \quad (2)$$

где $J_1^* < 0$ – энергия притяжения первых соседей;
 $J_3^* > 0$ – энергия отталкиванию третьих соседей.

В диссертационной работе использовались безразмерные величины в единицах абсолютного значения энергии отталкивания первых соседей, при этом было использовано отношение энергий $J = |J_3^* / J_1^*| = 3$. $T = |k_B T^* / J_1^*|$ – приведённая температура, T^* – температура системы, $\mu = |\mu^* / J_1^*|$ – приведенный химический потенциал, $h = |h^* / J_1^*|$ – приведенное значение энергии взаимодействия со стеной. Выбор параметра $J = 3$ объясняется тем, что при таком значении в системе формируются устойчивые фазы упорядоченных ламелей и ромбовидных кластеров в основном состоянии, которые остаются стабильными на большом интервале температур вплоть до критического значения ($T_{кр} = 0,95$). Также при небольших значениях химического потенциала системы или решеточной концентрации ($\mu > 0$, $c > 0,05$) в системе наблюдается преобладание кластеров, состоящих из более чем одной частицы.

Анализ равновесных и структурных характеристик производился исходя из результатов моделирования согласно методу Монте-Карло, алгоритму Метрополиса в большом каноническом ансамбле. Реализация этого алгоритма выполнена на языке Delphi в среде RadStudio. Анализ результатов выполнен с помощью языка Python и встроенных в него библиотек для научных исследований Numpy, Scipy, Pandas.

При анализе равновесных характеристик замкнутых систем обнаружено, что наиболее устойчивыми и поддающимися исследованию является кольцевая фаза ламелей. Для случая невзаимодействующей стенки ($h = 0$) на рисунке 1 представлены полученные основные состояния кольцевых фаз ламелей в зависимости от количества узлов M на стороне шестиугольника.



а – $M = 8$, б – $M = 9$, в – $M = 10$, г – $M = 11$.

В центре системы конструкция, содержащая ноль, одну, семь или 18 частиц, соответственно

Рисунок 1 – Основное состояние для разных размеров системы

Структуры чередующихся полос устойчивы для диапазона плотности, который при низких температурах очень узок. По этой причине следует рассматривать открытые системы с фиксированным химическим потенциалом, при котором большой термодинамический потенциал имеет минимум в равновесном состоянии. При шестиугольном ограничении большой термодинамический потенциал Ω определяется суммой вкладов, пропорциональных площади шестиугольника A (т.е. числу узлов в ограниченной области), длине его стороны M и величине, соответствующей дефекту в его центральной части D . Исходя из этого можно постулировать, что

$$\Omega = \omega_b A + (\Gamma_w + \Gamma_{db})M + D, \quad (3)$$

где ω_b – большой термодинамический потенциал, отнесенный к единице площади в неограниченной среде;

Γ_w – линейное натяжение на ограничивающих стенках;

Γ_{db} – линейное натяжение на границах доменов с различной ориентацией полос;

D – энергетическая составляющая дефекта в системе.

В случае полосчатой, некольцевой структуры внутри правильного шестиугольника $\Gamma_{db} = D = 0$ и $\Gamma_w = 2\gamma_{\parallel} + 4\gamma_t$, где $\gamma_{\parallel}$ и γ_t определяют линейное натяжение для полос, параллельных и наклонных к прилегающей стенке, соответственно. Для концентрических колец $\Gamma_w = 6\gamma_{\parallel}$, $\Gamma_{db} = 6\gamma_{db}$ и $D = d_c$, где d_c определяется дефектом в центре шестиугольника, который зависит от r – остатка от деления M на 4. Таким образом, устойчивая структура определяется параметрами, которые связаны с изгибной жесткостью полос.

Концентрические кольца стабильны тогда, когда

$$\Delta\Omega = 4(\gamma_t - \gamma_{\parallel}) - 6\gamma_{db} - d_c / M > 0, \quad (4)$$

то есть, когда полосы, параллельные стенкам, энергетически более выгодны по сравнению с наклонными к ним. Для рассматриваемой системы с параметром взаимодействия $J = 3$ и химическим потенциалом $\mu = 6$ получается, что $\Delta\Omega > 0$ при $M > 2$ (для $r = 0, 2$) и при $M > 11$ (для $r = 1, 3$).

При увеличении температуры в системе происходит плавление упорядоченных структур. В таких случаях возможны образования системы параллельных полос в центре шестиугольника. Помимо этого, при незначительном нагреве симметрия кольцевой структуры нарушается и при этом кольца сливаются в один кластер, представляющий собой спираль (рисунок 2).

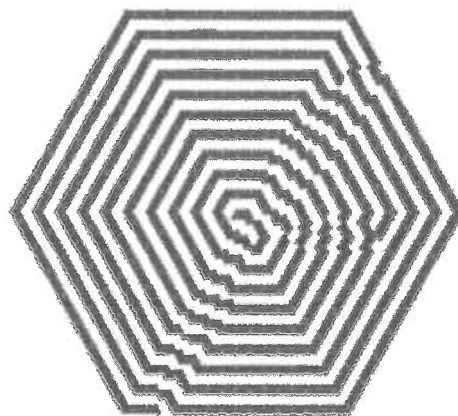


Рисунок 2 – мгновенный снимок SALR-системы с гексагональной оболочкой со стороной $M = 41$ при температуре $T = 0,35$

Однако такой метод образования спиральной структуры недостаточно устойчив. Для обеспечения возможности продуцирования в системе устойчивой хиральной структуры необходимо привнесение в нее нарушение симметрии. Оказалось, что введение треугольного клина в одну из вершин шестиугольной границы системы вызывает формирование устойчивой спирали, если сторона клина равна периоду полосчатой структуры.

При введении треугольного клина в одну из вершин шестиугольника адсорбированное на стенках кольцо разрывается, и два его конца, привносящие избыточную энергию d_e , возникают на двух сторонах клина. Разрыв полосы приводит к $D = d_c + 2d_e$. Если вместо колец возникает спираль, то длина доменной границы, инициируемой клином, укорачивается, что приводит к отрицательному вкладу в D . Более того, конец полосы образуется в центре шестиугольника, приводящий к дополнительному вкладу в D . Сумма этих двух вкладов обозначается через d_s . Таким образом, разность между большими потенциалами спирали и концентрических колец $(d_e + d_s) - (2d_e + 2d_c) = d_s - d_e - d_c$. Если $d_s - d_e - d_c < 0$ то спирали оказываются более энергетически выгодными.

Таким образом в рамках данной главы были изучены структурные и термические особенности замкнутых самоорганизующихся систем с конкурирующим взаимодействием. В частности, была анализирована самосборка ламеллярной кольцевой и спиральной структур. Полученные результаты демонстрируют два возможных сценария получения спиральной структуры: путем регулирования температуры или путем внедрения клина, который нарушает симметрию системы. В первом случае температура контролирует количество топологических дефектов, и, таким образом, кольцевая структура полос может разрушиться и слиться в одну полосу спиральной формы. Однако ни ориентацией спирали, ни положением конечной точки нельзя управлять, когда система симметрична. Введение клина дает контроль над спиралью. Важно отметить, что размер треугольного клина, необходимого для создания спирали, не зависит от размера системы, а определяется шириной полосы. Следовательно, относительно небольшое препятствие на ограничивающей стенке может привести к резким тополо-

гическим изменениям в исследуемой системе.

Третья глава посвящена изучению результатов адсорбции частиц на линейную инертную границу в рамках двумерной решеточной модели для полубесконечной системы. В данной главе также рассмотрены основные состояния SALR-системы вблизи инертной подложки с учетом взаимодействия приграничных частиц с ней. Установлено наличие кластеризации, отличной от объемной при одинаковых термодинамических параметрах.

Гамильтониан данной системы имеет аналогичную форму, как и в (1) за исключением различия радиус-векторов $\mathbf{x}$ приграничных узлов.

В случае одиночной граничной линии величина линейного избытка или адсорбции Гиббса Γ в рамках решеточной системы определяется следующим образом:

$$\Gamma(\mu) = \frac{1}{2} \sum_{z=0}^{B-1} (\rho_z(\mu) - \rho_c(\mu)), \quad (5)$$

где B – расстояние между ограничивающими стенками, которое задавалось достаточно большим для моделирования полубесконечной системы;

ρ_c – среднее значение плотности частиц в центральной трети системы;

ρ_z – среднее значение плотности частиц на z -м слое от стенки.

Поведение адсорбции исследовалось при различных внешних параметрах: температуре T и величине взаимодействия частиц со стенками h , а также химического потенциала осаждаемой фазы. Значения химического потенциала ограничены $\mu_{ph} = -1,0; -0,7; 0,0$ для $T = 0,5; 0,7; 1,0$ соответственно, чтобы избежать влияния эффектов фазового перехода на явления адсорбции. На рисунке 3 представлены полученные изотермы.

Для притягивающих стенок ($h < 0$) максимум адсорбции при низкой температуре $T = 0,5$ наблюдается при значении химического потенциала, которое соответствует неупорядоченной газовой фазе в объеме. При самом низком значении химического потенциала адсорбция слабая из-за очень низкой плотности частиц. С увеличением химического потенциала и, соответственно, насыпной плотности адсорбция также увеличивается до промежуточного значения химического потенциала, а затем начинает уменьшаться.

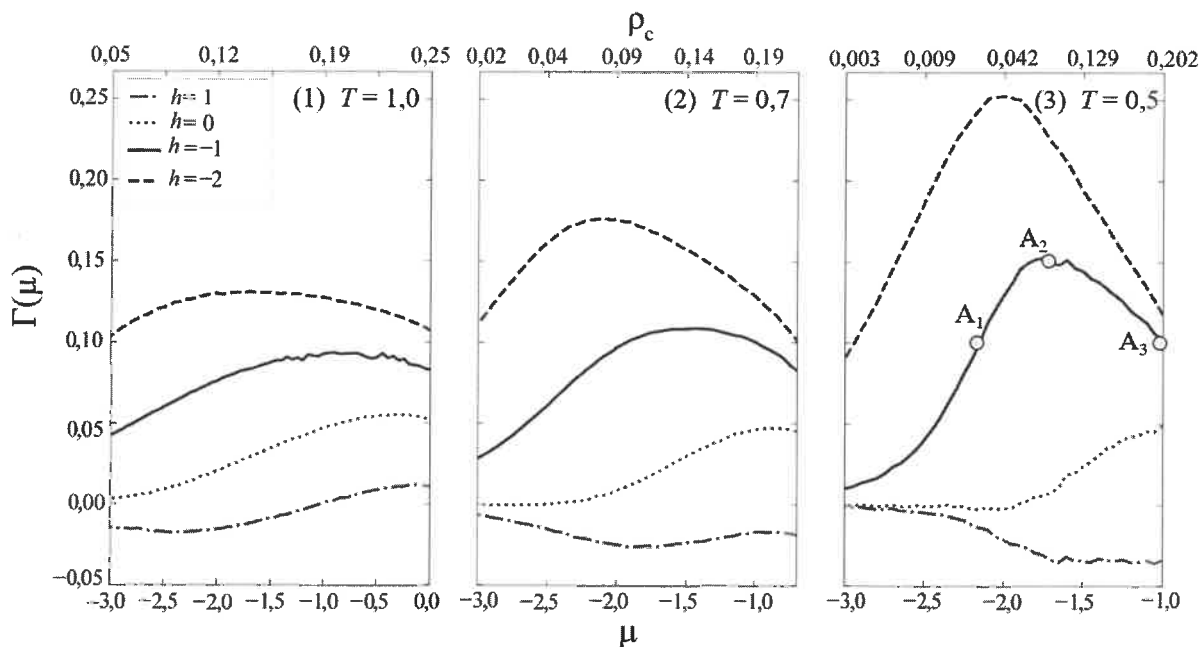


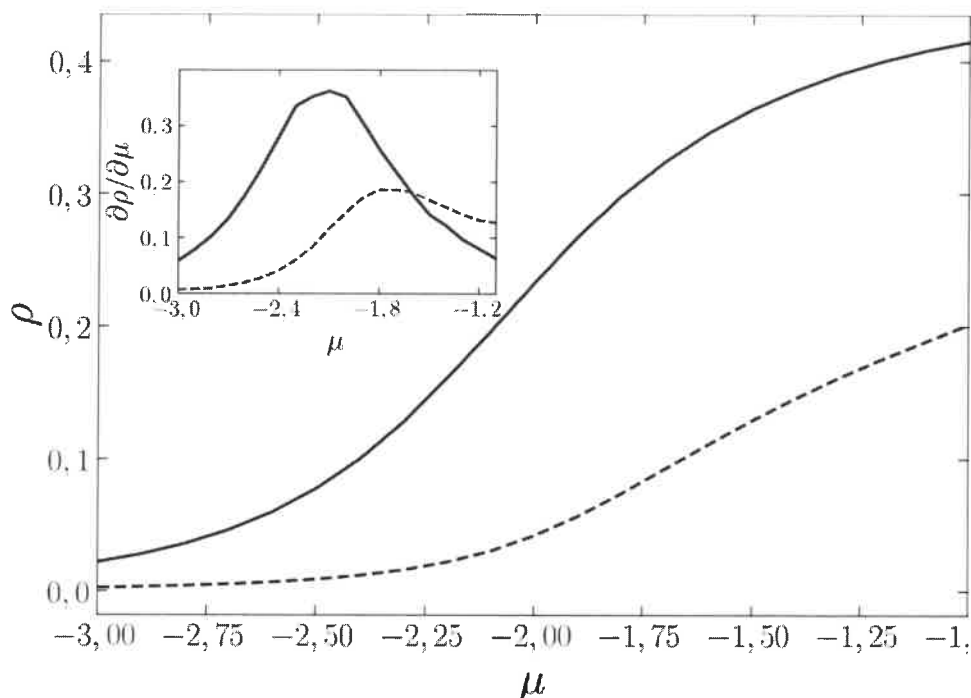
Рисунок 3 – Адсорбция Γ в зависимости от химического потенциала μ для различных значений параметра взаимодействия h при температурах системы $T = 1,0$ слева (1), $T = 0,7$ в центре (2) и $T = 0,5$ справа (3)

При повышении температуры ($T = 0,7; 1,0$) прилипание частиц к стенке становится менее интенсивным. В результате максимальные значения адсорбции уменьшаются с повышением температуры, а пик адсорбции сглаживается.

Дополнительную информацию можно получить из адсорбции на нейтральных и отталкивающих стенках. Нейтральная стенка ведет себя как притягивающая, особенно при химических потенциалах, соответствующих не очень малым концентрациям (рисунок 3). Определенно, этот факт является результатом дальнедействующего межчастичного отталкивания. Частицы в рядах, ближайших к стене, испытывают отталкивание со стороны объема системы и не испытывают такого воздействия со стороны стены. Этот аномальный эффект проявляется даже для отталкивающей стенки, что приводит к значительно более слабой отрицательной адсорбции по сравнению с притягивающей.

Известные аналитические приближения, такие как приближение среднего поля и квазихимическое приближение, для изучения явления адсорбции в таких сложных системах оказываются непригодными, так как они учитывают влияние только ближнего порядка. Однако проявление аномального поведения адсорбции можно продемонстрировать для более простых систем, в которых взаимодействие ограничено первой координационной сферой.

Из-за притяжения к стенке плотность частиц ρ_1 в примыкающем к ней ряду растет изначально быстрее с увеличением химического потенциала, чем в объеме ρ_c (рис.4). Однако, когда ρ_1 достигает значения, соответствующего максимальной адсорбции, ее рост замедляется.



На вставке показаны графики производная от ρ_0 и ρ_c по химическому потенциалу. Изменение темпа увеличения плотности числа частиц ρ_0 происходит в точке перегиба при $\mu = -2,1$.

Рисунок 4 – Зависимость средней плотности ρ_0 (сплошная линия) и в объеме ρ_c (пунктирная линия) при $T = 0,5$ и при параметре притяжения между стенкой и частицами $h = -1$

Полная адсорбция в основном определяется соперничеством отклонений плотности в двух ближайших к стенке рядах и двух последующих, что является результатом конкурирующих межчастичных взаимодействий. Дальнодействующее отталкивающее взаимодействие имеет незначительное влияние при низкой плотности частиц. С увеличением химического потенциала и за счет притяжения стенки плотность частиц в ближайших к стенке слоях возрастает до значений, когда межчастичное отталкивание начинает препятствовать увеличению плотности. Даже при самой низкой объемной плотности отношение (ρ_1/ρ_c) значительно меньше, чем коэффициент Больцмана $\exp(-h/T)$, особенно при $h = -2$. Это влияние межчастичного отталкивания, потому что ρ_1 достаточно велико, когда отталкивание может упорядочить систему в последовательность ромбов. Верхняя граница ρ_1 для слоя кластеров, которые не отталкиваются друг от друга, равна $\rho_1 = 0,5$. В то же время объемная плотность также увеличивается, а плотность в рядах 3 и 4 уменьшается до очень малых значений. Эти два слоя приводят к отрицательному вкладу в адсорбцию, и абсолютное значение этого вклада увеличивается с увеличением объемной плотности. Результатом этого является максимальная по химическому потенциалу зависимость полной адсорбции.

В результате можно отметить, что притягивающая поверхность, покрытая кластерами, изменяется на эффективно отталкивающую: отталкивающий барьер в ней образуется адсорбированными частицами, которые за счет взаимодействия друг с другом обладают более сильным отталкивани-

ем на больших расстояниях.

Интересным вытекает, что все исследованные структурные характеристики качественно изменяются при $\mu \approx \mu_{\max}$. Когда функция $\Gamma(\mu)$ возрастает в системе доминируют изолированные частицы (мономеры). При достижении $\mu = \mu_{\max}$ вероятность обнаружения мономера становится приблизительно одинаковой с вероятностью обнаружения частицы, принадлежащей какому-либо кластеру. Поэтому приграничные ряды заполняются более плотно за счет притяжения частиц на коротких дистанциях и притяжения самой стенки. Полученная структура индуцирует эффективный отталкивающий барьер, возникающий за счет межчастичного отталкивания на дальних дистанциях, в результате чего образуются обедненные ряды, которые и дают отрицательный вклад в величину адсорбции.

Максимум $\Gamma(\mu)$ может служить индикатором перехода между флюидом с преобладанием изолированных частиц и флюидом с преобладанием кластеров, а также проявлением ближнего порядка вблизи границы системы.

В четвертой главе изучены кинетические свойства самоорганизующихся SALR-систем. Исследовано влияние конкурирующего взаимодействия на эволюцию адсорбции монослоя без учета диффузии частиц на осаждаемой поверхности. Главное внимание уделено временным масштабам процесса и проявлению кооперативных эффектов, связанных с межчастичными взаимодействиями и формированием кластерных структур на границе раздела.

Форма термодинамического потенциала аналогична по форме моделям, рассмотренным в предыдущих главах:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{x}'} \hat{\rho}(\mathbf{x}) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\rho}(\mathbf{x}') - \mu \sum_{\mathbf{x}} \hat{\rho}(\mathbf{x}). \quad (6)$$

Используемая модель осаждаемой поверхности представляет собой плоскую треугольную решетку, узел которой может прицепить частицу (адсорбция) или испустить (десорбция). Для данного процесса может быть записано основное кинетическое уравнение, описывающее поведение и динамику данной системы при заданных начальных и внешних условиях.

$$\frac{d\hat{\rho}(\mathbf{x}, t^*)}{dt^*} = -\hat{\rho}(\mathbf{x}, t^*) W_d(\mathbf{x}, t^*) + (1 - \hat{\rho}(\mathbf{x}, t^*)) W_a(\mathbf{x}, t^*), \quad (7)$$

где $W_d(\mathbf{x}, t^*)$, $W_a(\mathbf{x}, t^*)$ – термически активированные скорости десорбции или адсорбции частиц соответственно.

После усреднения по неравновесному распределению уравнение (7) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{dc}{dt} = \begin{cases} -c \exp\left[\frac{E(t) - \mu}{T}\right] + (1 - c) & \text{для } E(t) - \mu \leq 0; \\ -c + (1 - c) \exp\left[\frac{\mu - E(t)}{T}\right] & \text{для } E(t) - \mu > 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $c(t) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \rangle$ и E соответственно средняя концентрация и энергия активации десорбции/адсорбции частицы в безразмерных единицах.

Для изучаемой SALR-системы ее эволюция поддается описанию только на кратчайших временных масштабах (при разложении первого шага Монте-Карло (МКШ)) и при низких значениях химического потенциала, когда межчастичное взаимодействие может быть незначительно. В таком случае кинетика адсорбции имеет первый порядок (ленгмюровский некооперативный тип), а эволюция концентрации описывается следующим выражением (в приведенных единицах):

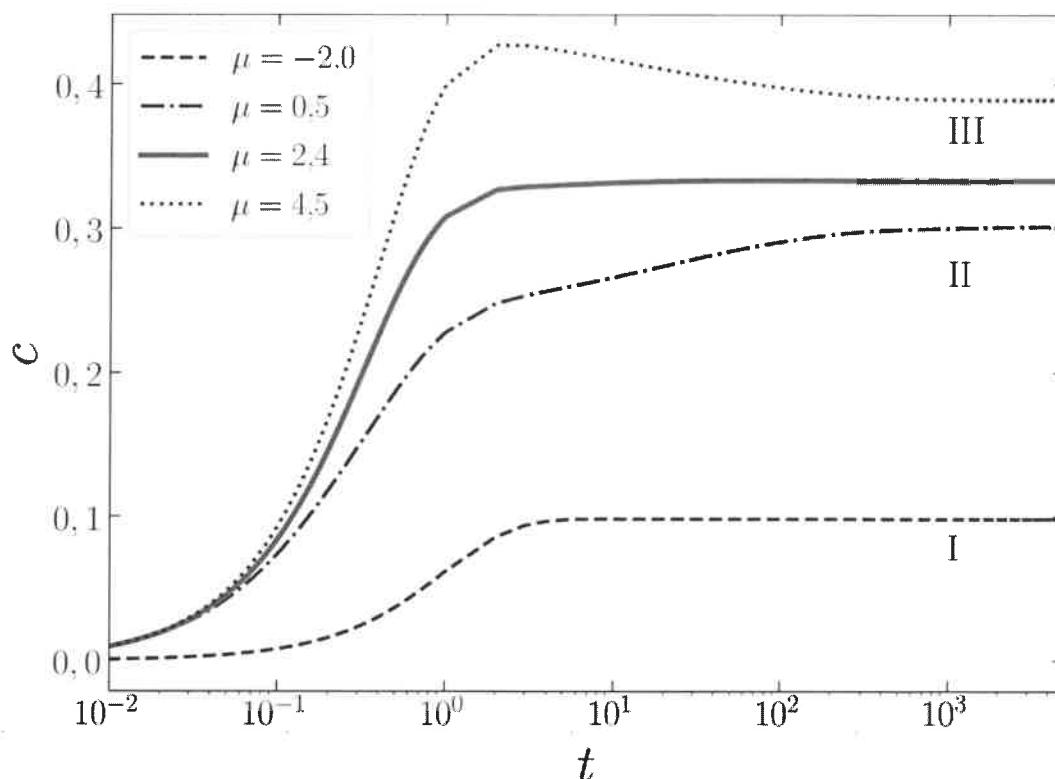
$$c(t) = (1 + \exp[-\mu / T])^{-1} (1 - \exp[-t / \tau]), \quad (9)$$

где время релаксации $\tau = (1 + \exp[-|\mu| / T])^{-1}$, которое изменяется от 0,5 до 1 МКШ.

С увеличением химического потенциала и плотности осажденных частиц взаимодействие между частицами играет важную роль. В результате даже в течение первого МКШ зависимость концентрации от времени сильно отличается от аналитического решения уравнения (9). Поскольку в течение одного шага выполняются L^2 испытаний (L – размер системы), концентрация в это время возрастает до довольно высокого значения, зависящего от химического потенциала. Осажденные частицы вынуждены преодолевать сопротивление частиц, уже осажденных на поверхности, и процесс адсорбции становится ограничен барьером.

На более длительном временном масштабе интенсивность адсорбции уменьшается и зависимость средней частичной концентрации от числа МКШ приобретает три различных типа в различных областях химического потенциала (рисунок 5).

В общих чертах, процесс адсорбции для таких кластер-образующих систем имеет довольно сложную природу и не может быть описан комбинацией нескольких экспоненциальных функций. Для второго и третьего типов эволюции не оказалось возможным разработать идентичную процедуру подгонки, основанную на экспоненциальных функциях. Вместо этого оценка общего характерного времени адсорбции в зависимости от химического потенциала адсорбента или равновесной концентрации адсорбата была основана на достижении равновесного значения концентрации частиц в системе. Характерное *полное* время (τ_{ct}) можно оценить как время, когда интеграл отклонения решеточной концентрации от своего среднего значения начинает не зависеть от верхнего предела.



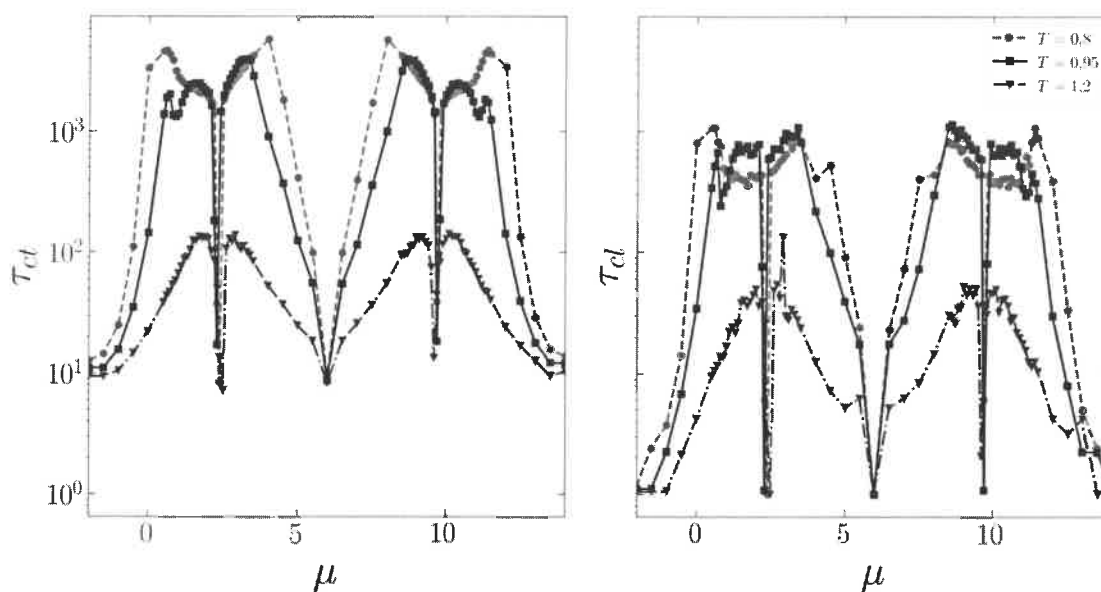
Нижняя (I), средняя (II) и верхняя (III) кривые представляют первый, второй и третий типы концентрационной релаксации соответственно. Выделенная красная (сплошная) кривая ($\mu = 2,4$) соответствует релаксационной кривой для системы с высокоупорядоченным распределением ромбов в ней.

Рисунок 5 – Три типа изотермической ($T = 0,8$) концентрационной эволюции системы при различных значениях химического потенциала

Дополнительная характеристика временной эволюции во время эквиприблизации состоит из последовательности времен релаксации на различных временных интервалах. Такую последовательность можно определить как временные интервалы, в течение которых отклонение от равновесного значения уменьшается в e раз. Первый такой интервал определяет *длительнейшее* время релаксации (τ_{cl}).

Полученные зависимость полного и длительнейшего времен релаксации концентрации от химического потенциала показана на рисунке 6. Кривые являются симметричными относительно точки $c = 0,5$ ($\mu = 6,0$) из-за симметрии топологии фаз в системе: частицы замещаются вакансиями, и фаза упорядоченных ромбов замещается фазой упорядоченных ромбоидальных пузырей.

Наряду с эволюцией концентрации эволюционирует и внутренняя энергия системы. Концентрация показывает эволюцию одночастичной функции распределения, в то время как релаксация энергии показывает эволюцию многочастичных функций распределения. Помимо этого, эволюция внутренней энергии имеет гораздо разнообразное поведение (рисунок 7).



Глубокие минимумы соответствуют значениям концентрации $c = 1/3, 1/2$ и $2/3$ ($\mu = 2,4; 6,0; 9,6$ соответственно) при которых существует высокоупорядоченное фазовое состояние.

Рисунок 6 – Полное и длительнейшее время релаксации концентрации для SALR систем в зависимости от химического потенциала при различных температурах

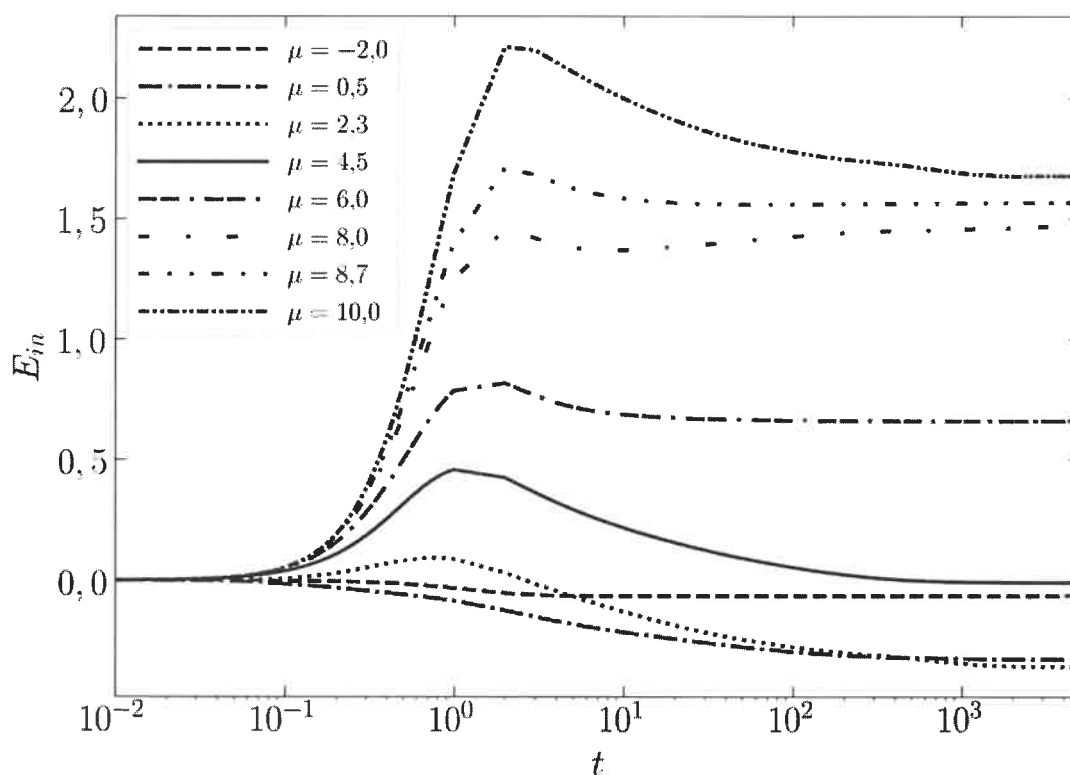


Рисунок 7 – Кривые релаксации энергии при $T = 0,8$ и различных значениях химического потенциала

При малых значениях химического потенциала энергия монотонно убывает, что связано с наличием в системе кластеров с отрицательной

энергией: димеров, треугольников и ромбов, возникших под действием притяжения ближайших соседей.

С увеличением химического потенциала в системе вначале образуются пары третьих соседей, которые увеличивают энергию, после чего ромбовидные кластеры образуются до своей упорядоченной фазы и тем самым вызывают уменьшение энергии. Последующее насыщение концентрации приводит к тому, что форма кривой релаксации энергии имеет характерные точки максимума и минимума, отражающие приоритет взаимодействия между частицами: максимумы, демонстрируют предпочтение оттапливания, а минимумы – притяжения на разных этапах достижения равновесия. В условиях, когда существует область с остатками ламелей, конкурирующее взаимодействие приводит к более длительному уравниванию многочастичного распределения по сравнению с эволюцией концентрации. Как и в случае релаксации концентрации полное τ_{et} и длительнейшее τ_{el} время релаксации внутренней энергии определялось аналогично. Полученные зависимости от химического потенциала представлены на рисунке 8.

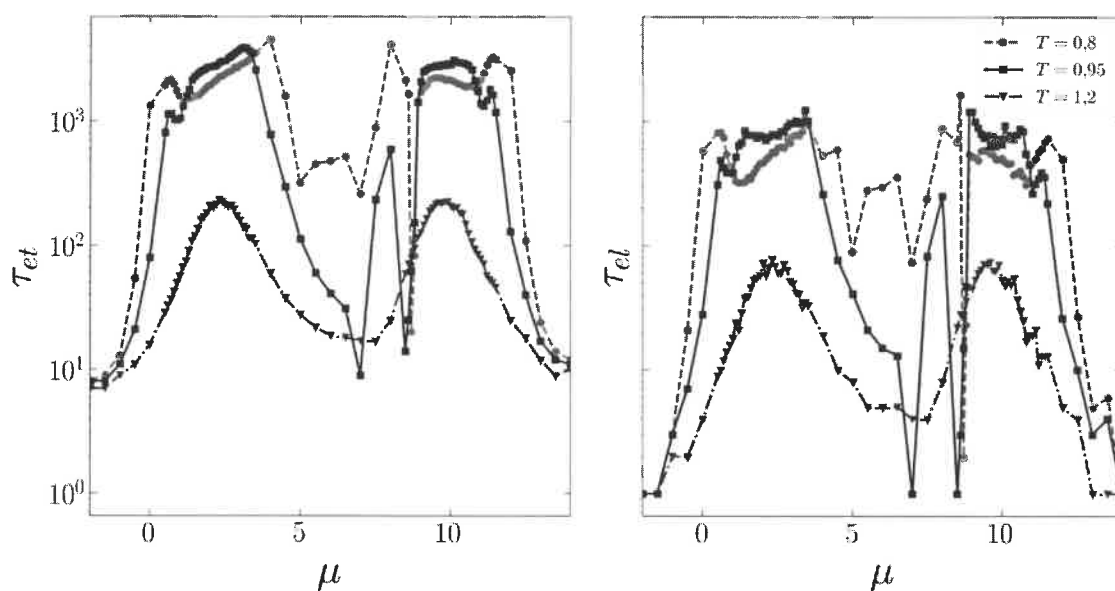


Рисунок 8 – Полное (левая панель) и длительнейшее (правая панель) время релаксации внутренней энергии в зависимости от химического потенциала при различных температурах

В областях нестабильных и неупорядоченных фаз достижение равновесия сопровождается длительным монотонным процессом, в котором энергия стремится к равновесному значению. Распределение времен релаксации, а также их абсолютные значения по большей части соответствуют значениям для эволюции концентрации. Существенные различия возникают при значениях химического потенциала $\mu \in (5;7)$, где наблюдается область со следами ламелей. Полное время релаксации энергии в этом регионе значительно больше полного времени релаксации концентрации.

Взаимное перераспределение частиц продолжается долгое время после достижения концентрацией равновесного значения. Также можно отметить сложную зависимость полного времени релаксации от температуры и химического потенциала в этой области. Распределение времен релаксации энергии несимметрично относительно концентрации $c = 0,5$ из-за более сложного перераспределения частиц в тесном окружении при $c > 0,5$ ($\mu > 6,0$).

При температурах 0,8 и 0,95 наблюдается глубокий минимум полного времени релаксации энергии при $\mu \approx 8,7$ что не соответствует высокоупорядоченному состоянию ромбовидных пузырьков, которые существуют при $\mu = 9,6$ и $c = 2/3$. В этом регионе образуется своего рода щель: флуктуации энергии здесь в ходе моделирования малы из-за конкуренции между притягивающей и отталкивающей частями взаимодействия.

В SALR системе в области упорядоченных ромбов или пузырьков насыщение частиц происходит за короткий промежуток времени. В этом случае концентрация оказывается очень близкой к равновесной, но истинного равновесного состояния по-прежнему нет. За несколько шагов частицы создают доменную структуру, состоящую из ромбовидных кластеров (или пустот) различной ориентации. При дальнейшем моделировании кластеры выбирают только одно приоритетное направление ориентации (всего их может быть 3) и доменная структура исчезает. При этом энергия системы уменьшается, чем при начальном насыщении. Этот процесс занимает значительное время, что отражает разницу между релаксацией концентрации и энергии в этих областях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Показана пригодность методов Монте-Карло и решеточных моделей для разработки и реализации двумерных кластер-образующих систем с конкурирующим взаимодействием при наличии пространственных ограничений. Данное рассмотрение позволяет исследовать структурные особенности системы с конкурирующими взаимодействиями с пространственными дефектами в виде замкнутой шестиугольной границы и линейного ограничения в одном из направлений [1, 2].

2. Используя термодинамическое рассмотрение замкнутых гексагональных систем, сформулированы условия образования в них концентрических, спиральных и полосчатых структур. Получены выражения для средней решеточной концентрации и внутренней энергии системы в зависимости от ее размера при условиях существования ламеллярной фазы [1, 4, 5].

3. С помощью компьютерного моделирования обнаружен и качественно объяснен эффект аномальной адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями, а также частиц с отталкиванием ближайших соседей, взаимодействующих с линейной инертной границей. [2, 6, 9].

4. Разработана и реализована модель для исследования кинетических особенностей системы с конкурирующими взаимодействиями в рамках процесса адсорбции/десорбции монослоя частиц на плоскую поверхность на основе метода Монте-Карло [3].

5. С использованием основного кинетического уравнения и метода Монте-Карло изучены особенности эволюции концентрации и внутренней энергии системы с конкурирующими взаимодействиями. Показано, что пригодность аналитического рассмотрения кинетики возможно при условиях, когда межчастичное взаимодействие не является существенным и в системе не образуются кластеры частиц. [3, 7, 8].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Проведенные исследования носят фундаментальный теоретический характер, углубляют понимание термодинамики и кинетических процессов в кластер-образующих самоорганизующихся системах, что способствует разработке новых материалов с заданными свойствами. Разработанные и изученные механизмы регуляции процесса эволюции и структуризации в столь сложных системах позволят в дальнейшем применять их в различных отраслях медицины, нанобиотехнологий и материаловедении:

- 1) при поиске способов стабилизации эмульсий;
- 2) при создании биосенсорных матриц и биоинтерфейсов, требующих изготовления макроскопических по размерам регулярных структур с нанометровой точностью расположения элементов в них;
- 3) в блок-сополимерной литографии;
- 4) при изготовлении хирургических и терапевтических резорбируемых имплантов;
- 5) при синтезе нанофлюидов.

Разработанные модели существенно сокращают необходимость дорогостоящих экспериментальных исследований, поскольку многие результаты могут быть предсказаны на основе значительно более дешевых аналитических вычислений и компьютерного моделирования.

Кроме этого, результаты исследований обеспечивают более глубокое понимание поведения теоретически и практически важного класса самоорганизующихся систем, что позволяет использовать их в учебном процессе при освоении курсов теоретической и прикладной механики. В частности, некоторые результаты данной работы уже внедрены в учебный процесс Учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет» в рамках курса «Прикладная механика» читаемого для студентов химико-технологических специальностей.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в рецензируемых журналах, включенных в перечень ВАК

1. Pekalski, J Self-assembly of spiral patterns in confined systems with competing interactions / J. Pekalski, E. Bildanau, A. Ciach / Soft Matter. – 2019. – Vol. 19. – P. 7715-7721.
2. Bildanau, E Adsorption anomalies in a two-dimensional model of cluster-forming systems / E. Bildanau, J. Pekalski, V. Vikhrenko, A. Ciach // Physical Review E. – 2020. – Vol. 101. – Art. 012801 (8 p.).
3. Bildanau, E. Adsorption time scales of cluster-forming systems / E. Bildanau and V. Vikhrenko // Euro. Phys. J. E. – 2021. – Vol. 44, № 51. – P. 1–12.

Статьи, опубликованные в рецензируемых журналах

4. Бильданов Э. Э. Основные состояния ламеллярной структуры SALR-системы в гексагональном окружении // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. – 2021. – № 1 (242). – С. 19–24.

Тезисы докладов

5. Бильданов Э. Э. Эффекты ограничений в ламеллярных самоорганизующихся системах / Э. Э. Бильданов, Я. Пекальский // 83-я научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием): тезисы докладов, Минск, 4–15 февраля 2019 г. [Электронный ресурс], отв. за издание И. В. Войтов, УО «БГТУ». – Минск: БГТУ, 2019. – С. 30. – <https://elib.belstu.by/handle/123456789/28418>
6. Бильданов Э. Э. Адсорбция частиц в кластер-образующих системах с конкурирующим взаимодействием / Э. Э. Бильданов, В. С. Вихренко, Я. Пекальский, А. Цях // 84-я научно-практическая конференция, посвященная 90-летию юбилею БГТУ и Дню белорусской науки (с международным участием): тезисы докладов, Минск, 3–14 февраля 2020 г. [Электронный ресурс], отв. за издание И. В. Войтов, УО «БГТУ». – Минск: БГТУ, 2020. – С. 115–117. – <https://elib.belstu.by/handle/123456789/33366>
7. Бильданов Э. Э. Влияние кластер-образования на времена адсорбции в системах с конкурирующим взаимодействием // XI Республиканская научно-техническая конференция «Новые функциональные материалы, современные технологии и методы исследования»: тезисы докладов, Гомель ИММС НАН РБ. – 2020. – С. 135.
8. Бильданов Э. Э. Особенности кинетики адсорбции в системах с конкурирующим взаимодействием / Э. Э. Бильданов, Я. Г. Грода // 85-я

научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием): тезисы докладов, Минск, 1–13 февраля 2021 г. [Электронный ресурс], отв. за издание И. В. Войтов, УО «БГТУ». – Минск: БГТУ, 2021. – С. 237–239. – <https://elib.belstu.by/handle/123456789/40833>

9. Бильданов Э. Э. Адсорбция частиц решеточного флюида с отталкиванием ближайших соседей на линейную инертную притягивающую границу / Э. Э. Бильданов, Я. Г. Грода, Р. Н. Ласовский // 86-я научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников и аспирантов (с международным участием): тезисы докладов, Минск, 31 января – 12 февраля 2022 г. [Электронный ресурс], отв. за издание И. В. Войтов, УО «БГТУ». – Минск: БГТУ, 2022. – С. 184–187. – <https://elib.belstu.by/handle/123456789/48026>

10. Groda Ya. G., Bildanau E. E. Equilibrium and transport characteristics of a lattice fluid on an energetically inhomogeneous non-rectangular lattice // Abstract of IV CONIN Workshop «Complex interactions, clustering, swarming, and effects of confinement» – Serock, IChP, 2022. – p. 23.



РЭЗЮМЭ

Більданаў Эльдар Эміравіч

Мадэляванне эвалюцыі рашотачных сістэм з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі

Ключавыя словы: рашотачная сістэма, метады Монтэ-Карла, абмежаваная сістэма, ламелярная структура, адсорбцыя, кластарызацыя, хімічны патэнцыял, лінейная мяжа, эвалюцыя сістэмы часціц, асаджэнне манаслоя часціц, кінетыка, часы рэлаксацыі, нанаструктурызацыя.

Мэта работы – распрацоўка праграмных сродкаў статыстычнага мадэлявання і тэарэтычных асноў статыстычна-механічнага аналізу раўнаважкіх уласцівасцяў замкнёных і незамкнёных сістэм з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі, а таксама працэсу іх выхаду да раўнаважнага стану.

Метады даследавання: для дасягнення пастаўленай у дысертацыі мэты выкарыстоўваліся мадэлі рашотачных сістэм і метады Монтэ-Карла.

У выніку праведзеных у дысертацыі даследаванняў пабудаваны рэшотачныя мадэлі для вывучэння з'явы адсорбцыі сістэмы з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі на інэртнай лінейнай мяжы, а таксама для вывучэння кінетыкі адсорбцыі часціц з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі, якія ўтвараюць манаслой на інэртнай плоскай паверхні.

Вызначаны ўмовы ўтварэння і спосабы кіравання ламеляльнымі, канцэнтрычнымі і спіральнымі структурамі ў сістэме з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі з прасторавымі абмежаваннямі.

Інтэрпрэтаваны і выяўлены эфект анамальнай адсорбцыі часціц з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі з улікам іх ўзаемадзеяння з лінейнай інэртнай мяжой.

Устаноўлены і вывучаны характэрныя асаблівасці эвалюцыі канцэнтрацыі і ўнутранай энергіі сістэмы часціц з канкуруючымі ўзаемадзеяннямі пры яе пераходзе з пачатковага нераўнаважнага да раўнаважнага стану.

Рэкамендацыі па выкарастанні і вобласць прымянення: практычная значнасць атрыманых вынікаў заключаецца ў магчымасці іх выкарыстання пры пошуку спосабаў стабілізацыі эмульсій, пры стварэнні біясэнсарных матрыц і біяінтэрфейсаў, якія патрабуюць вырабу макраскапічным па памерах рэгулярных структур з нанаметровай дакладнасцю размяшчэння элементаў у іх, а таксама пры распрацоўцы і стварэнні новых нанаструктураваных матэрыялаў, ўласцівасцямі якіх можна кіраваць знешнімі ўздзеяннямі.

РЕЗЮМЕ

Бильданов Эльдар Эмирович

Моделирование эволюции решеточных систем с конкурирующими взаимодействиями

Ключевые слова: решеточная система, метод Монте-Карло, ограниченная система, ламеллярная структура, адсорбция, кластеризация, химический потенциал, линейная граница, эволюция системы частиц, осаждение монослоя частиц, кинетика, времена релаксации, наноструктуризация.

Цель работы: разработка программных средств статистического моделирования и теоретических основ статистико-механического анализа равновесных свойств замкнутых и незамкнутых систем с конкурирующими взаимодействиями, а также процесса их выхода к равновесному состоянию.

Методы исследования: для достижения поставленной в диссертации цели использовались модели решеточных систем и методы Монте-Карло.

В результате проведенных в диссертации исследований построены решеточные модели для изучения явления адсорбции системы с конкурирующими взаимодействиями на инертной линейной границе, а также для изучения кинетики адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями, образующие монослой на инертной плоской поверхности.

Определены условия образования и способы управления ламеллярными, концентрическими и спиральными структурами в системе с конкурирующими взаимодействиями с пространственными ограничениями.

Интерпретирован и обнаружен эффект аномальной адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями с учетом их взаимодействия с линейной инертной границей.

Установлены и изучены характерные особенности эволюции концентрации и внутренней энергии системы частиц с конкурирующими взаимодействиями при ее переходе из начального неравновесного в равновесное состояние.

Рекомендации по использованию и область применения: практическая значимость полученных результатов заключается в возможности их использования при поиске способов стабилизации эмульсий, при создании биосенсорных матриц и биоинтерфейсов, требующих изготовления макроскопических по размерам регулярных структур с нанометровой точностью расположения элементов в них, а также при разработке и создании новых наноструктурированных материалов, свойствами которых можно управлять внешними воздействиями.

SUMMARY

Bildanau Eldar Emiravich

Modeling the evolution of lattice systems with competing interactions

Keywords: lattice system, Monte-Carlo method, closed systems, lamellar structure, linear boundary, evolution of a particle system, kinetics, relaxation times, nanostructuring.

The purpose of the theses is the development of a software tools for statistical modeling and theoretical foundations of statistical and mechanical analysis of the equilibrium properties of closed and unclosed systems with competing interaction, as well as the process of their reaching to the equilibrium state.

Research methods: the lattice models and Monte-Carlo computer simulations were used to attain the declared purpose.

As a result of the research carried out in the theses the lattice models were constructed for studying the phenomena of adsorption of a system with competing interactions on an inert linear boundary, as well as studying the adsorption kinetics of a system with competing interactions forming a monolayer on an inert flat surface.

The conditions of formation and methods of control of lamellar, concentric and spiral structures in the system with competing interactions with spatial constraints are determined.

The effect of anomalous adsorption of particles with competing interactions is interpreted and detected, taking into account their interaction with a linear inert boundary.

The characteristic features of the evolution of the concentration and internal energy of a system of particles with competing interactions during its transition from the initial nonequilibrium to the equilibrium state are established and studied.

Recommendations for use and field of application: the practical significance of the obtained results lies in the possibility of their use in the search for ways to stabilize emulsions, in the creation of biosensor matrices and biointerfaces requiring the manufacture of macroscopic regular structures with nanometer accuracy of the arrangement of elements in them, as well as in the development and creation of new nanostructured materials whose properties can be controlled by external influences.

БИЛЬДАНОВ Эльдар Эмирович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ С
КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

АВТОРЕФЕРАТ

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

Подписано в печать «30» 01 2024 г. Формат 60×90 1/16
Бумага – офисная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,5.
Уч.-изд. л. 1,2. Тираж 60 экз. Заказ № 2.

Государственное научное учреждение «ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени
Б. И. СТЕПАНОВА НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»
220072, Республика Беларусь, г. Минск, пр. Независимости, 68-2
Отпечатано на ризографе ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси