

На правах рукописи



Петрова Татьяна Олеговна

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ПОЛЕЙ
НА РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В СИСТЕМАХ С ОРИЕНТАЦИОННЫМИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург

2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении профессионального образования «Череповецкий государственный университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент
Максимова Ольга Геннадьевна
(ФГБОУ ВПО «Череповецкий государственный университет», кафедра физики)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич
(ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный университет», кафедра молекулярной биофизики)

кандидат физико-математических наук,
Кушева Ирина Васильевна
(ЦТК ОАО «Северсталь», лаборатория неразрушающего контроля)

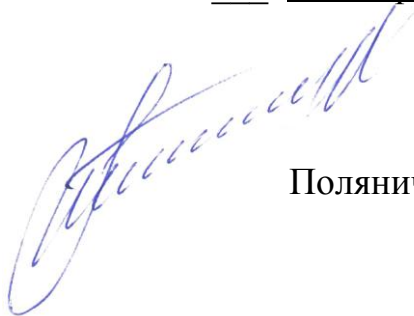
Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Вологодский государственный технический университет».

Защита состоится «___» ноября 2013г. в ___ часов ___ мин. на заседании совета Д 212.232.33 по защите докторских и кандидатских диссертаций при Санкт-Петербургском государственном университете по адресу: 198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская 1, аудитория В-04 Физического факультета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета.

Автореферат диссертации разослан «___» октября 2013г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.232.33
кандидат физико-математических наук



Поляничко А.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Физика сегнетоэлектриков, жидких кристаллов (ЖК) и других систем с различными типами ориентационного порядка в настоящее время является одним из ведущих разделов физики конденсированного состояния. С одной стороны, это связано с фундаментальным характером физических идей, многогранностью и общностью проблем и методов их решения, возникающих при изучении электрических, оптических и других свойств частично упорядоченных систем (“мягкой материи”). С другой стороны, интерес к этим системам обусловлен быстро растущим применением низко- и высокомолекулярных ЖК и сегнетоэлектрических новых материалов в качестве различных датчиков и преобразователей в радио- и акусто-электронике, нелинейной оптике и др. перспективных областях науки и техники. Кроме того, в этих областях с традиционными неорганическими (низкомолекулярными) сегнетоэлектриками и ЖК стали успешно конкурировать полимерные системы. Например, поливинилиденфторид (ПВДФ) и его сополимеры обладают наличием переключаемой электрическим полем спонтанной поляризации, нелинейными пьезоэлектрическими, пироэлектрическими и оптическими свойствами (работы Mulder M., Mischler C., Baschnagel J., Dasgupta S., Wang T., Furukawa T., Date M., Fukada E., Lovinger A.J., Блинов Л.М., Фридкин В.М., Палто С.П., Буне А.В., Даубен П.А., Дюшарм С. и др.).

Исследование равновесных свойств анизотропных сред, таких как кристаллы, сегнетоэлектрики, ЖК и др., внесли также огромный вклад в понимание структуры конденсированного состояния. Основные особенности физических характеристик систем, находящихся в ориентированном состоянии, прежде всего, связаны с геометрической анизотропией структурных единиц этих систем. Кроме того, физико-химические свойства подобных низкомолекулярных или полимерных материалов в значительной степени зависят от внутри- и межмолекулярного трансляционного и ориентационного порядка и подвижности соответствующих кинетических структурных единиц (молекул, фрагментов полимерных цепей и др.). В области фазовых переходов в частично или полностью упорядоченное

состояние для указанных систем обычно характерны существенные аномалии их диэлектрических и других свойств, которые оказываются весьма чувствительными к электрическим, магнитным полям и др. внешним воздействиям. Поэтому изучение поведения различных веществ в области фазовых превращений является одной из *актуальных проблем* физики конденсированного состояния. Важным является также направление, связанное с исследованием структуры поверхностей новых полимерных композитных материалов, например, тонколистового оцинкованного металлопроката с полимерными покрытиями, для выявления причин появления дефектов продукции и разработки методов для их устранения, связанными с такой важной характеристикой при производстве этих покрытий, как *пиковая температура* металла (ПТМ), при которой достигается максимальная адгезия полимера и обеспечиваются наиболее важные технические показатели для обеспечения требуемых параметров покрытия (блеска, прочности и др.).

Объектом исследования диссертационной работы являются частично упорядоченные системы с ориентационными взаимодействиями (сегнетоэлектрики, жидкие кристаллы и др.). Особое внимание будет направлено на изучение этих систем во внешних полях, в области вблизи фазовых переходов, где неприменима классическая теория Ландау.

Цель работы: исследование с помощью аналитических приближений и методов компьютерного моделирования равновесных и критических свойств систем с различными типами ориентационного порядка, возникающего как спонтанно, так и при наличии внешних электрических полей, теоретическая интерпретация известных и предсказание новых экспериментальных закономерностей.

Достижение данной цели было обеспечено решением следующих **задач**:

1. С помощью аналитических методов исследовать фазовый переход из изотропного в упорядоченное состояние в двумерных решеточных системах ротаторов с анизотропными ориентационными взаимодействиями: определить точку перехода и рассчитать параметры ориентационного порядка в различных направлениях системы.
2. Разработать программное обеспечение (вычислительный комплекс) для компьютерного моделирования и расчета равновесных и критических

свойств частично упорядоченных систем с ориентационными взаимодействиями методом Монте-Карло. Протестировать, проверить адекватность и определить критерии сходимости разработанных алгоритмов комплекса с помощью сравнения рассчитанных характеристик с результатами известных аналитических теорий и экспериментальными данными.

3. Исследовать влияние межмолекулярных взаимодействий, температуры и внешних электрических полей на параметры ближнего и дальнего ориентационного порядка для двумерных и трехмерных систем с взаимодействиями дипольного и квадрупольного типов. Рассчитать температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и других макроскопических характеристик сегнето-, антисегнетоэлектрических и жидкокристаллических систем.
4. Провести изучение поверхностных свойств полимерных покрытий (на примере ПВДФ) для листового металлопроката. Определить зависимости ПТМ от химической природы полимера, концентрации растворителя, скорости движения полосы металла с полимерным покрытием в сушильной печи и других факторов производственного процесса.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (соглашения № 14.В37.21.0457, № 14.132.21.1701 и № 01201151196).

Научная новизна результатов работы заключается в том, что в ней впервые:

1. Вариационным методом изучена двумерная система ротаторов с анизотропными ориентационными взаимодействиями. Найдена точка фазового перехода 1-го рода, рассчитаны параметры ближнего ориентационного порядка в различных направлениях системы.
2. Разработан программный комплекс для исследования равновесных и критических свойств двумерных и трехмерных низкомолекулярных и полимерных сегнето- и антисегнетоэлектрических, жидкокристаллических систем в зависимости от их внутренних параметров (констант ориентационных взаимодействий) и внешних условий (температуры, амплитуды и частоты электрических полей).

3. Получены зависимости комплексной диэлектрической восприимчивости для сегнето- и антисегнетоэлектрических систем от частоты внешнего поля при различных значениях температуры и констант взаимодействий.
4. На основании результатов компьютерного моделирования сформулированы рекомендации для оптимального проведения технологического процесса сушки ПВДФ покрытий металлов.

Научная значимость работы состоит в том, что для компьютерного моделирования фазовых переходов и расчета различных равновесных свойств частично упорядоченных низкомолекулярных и полимерных систем с различными типами ориентационного порядка методом Монте-Карло был создан программный комплекс МК-ORDER[©] (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013610009). Теоретические закономерности, полученные с помощью данного комплекса, могут быть использованы при интерпретации данных, обнаруженных для этих систем различными экспериментальными методами.

Практическая значимость работы состоит в том, что результаты изучения поверхностных свойств полимерных покрытий металла позволяют сформулировать определенные рекомендации для проведения технологического процесса сушки полимерного ПВДФ покрытия листового металлопроката (в цехе полимерных покрытий ОАО «Северсталь» и на других металлургических предприятиях).

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Вариационный метод может быть использован для исследования эффектов упорядочения, определения температуры фазового перехода и расчета параметров ближнего ориентационного порядка в двумерных анизотропных низкомолекулярных и полимерных пленках.
2. Создан программный комплекс, который позволяет провести исследование равновесных характеристик двумерных и трехмерных систем с ориентационными взаимодействиями с помощью метода Монте-Карло.
3. С помощью разработанного программного комплекса возможно изучение влияния внутренних и внешних факторов на свойства фазовых переходов из изотропного в ориентационно упорядоченное состояние в двумерных и трехмерных системах.

4. Изучение поверхностных эффектов в полимерных покрытиях металлов позволяет объяснить зависимость максимального значения адгезии от пиковой температуры металла, толщины покрытия и скорости движения стального листа в сушильной печи, подтверждаемыми результатами производственных испытаний.

Достоверность полученных результатов и выводов, сделанных в диссертации, основана на использовании обоснованных методов статистической физики и методов компьютерного моделирования, обобщенных для описания анизотропных низкомолекулярных и полимерных систем с ориентационным порядком. Основные выводы работы находятся в хорошем количественном или качественном соответствии с данными, полученными аналитическими и экспериментальными методами.

Апробация результатов исследования. Результаты исследований были представлены на следующих всероссийских и международных конференциях и семинарах: Всероссийской научно-практической конференции «Череповецкие научные чтения» (Череповец, 2010), XLIX-ой Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирск, 2011), 17-ой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых «ВНКСФ-17» (Екатеринбург, 2011), 12-ой международной конференции «Физика диэлектриков» (Санкт-Петербург, 2011), 19-ой Всероссийской конференции по физике сегнетоэлектриков «ВКС-XIX» (Москва, 2011), 7-ой Санкт-Петербургской конференции молодых ученых с международным участием «Современные проблемы науки о полимерах» (Санкт-Петербург, 2011), Конференции-конкурсе молодых физиков (Москва, 2012), 7-ой Всероссийской Каргинской конференции «Физико-химия полимеров» (Тверь, 2012), 7-ом международный семинаре по физике сегнетоэластиков (Воронеж, 2012), 1-ой международной Интернет-конференции «На стыке наук. Физико-химическая серия» (Казань, 2013), Международной конференции TechConnect World 2013 (Вашингтон, 2013).

Личный вклад автора состоял в решении поставленных задач с помощью разработанных аналитических и компьютерных методов расчета, разработке программного комплекса MK-ORDER[©], а также анализе и использовании полученных результатов при интерпретации экспериментальных данных, формулировке и обобщении выводов.

Публикации. Материалы диссертации отражены в 17 публикациях, в том числе в 9 статьях и 8 тезисах и материалах докладов на региональных, всероссийских и международных конференциях и семинарах. Имеется 1 авторское свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, библиографического списка (128 наименований) и приложения, в котором приведено подробное описание ПК МК-ORDER[©].

Полный объем работы составляет 136 страниц, 43 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертация построена следующим образом. Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи работы, раскрыты научная новизна, практическая значимость полученных результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту.

В **Главе 1** проведен аналитический обзор непосредственно связанных с темой диссертации теоретических моделей и методов, применяемых для изучения внутри- и межмолекулярного порядка, а также локальной подвижности, как в низкомолекулярных, так и в полимерных системах с различными типами ориентационного порядка, возникающего как спонтанно, так и при наличии внешних полей. Проанализированы результаты работ, полученные для этих систем с различными типами ориентационного порядка аналитическими, экспериментальными и компьютерными методами.

В **Главе 2** совместно с к.ф.-м.н., доцентом Максимовой О.Г. и д.ф.-м.н., профессором Максимовым А.В. с помощью аналитических приближений и компьютерного моделирования методом Монте-Карло были изучены эффекты упорядочения в двумерных сегнетоэлектрических системах с анизотропными ориентационными взаимодействиями. Для исследования этих эффектов используется двумерная решеточная модель (рис.1), в каждом узле которой находится анизотропная удлиненная частица – ротатор, обладающий вращательными (ориентационными) степенями свободы. Предполагается, что ротаторы взаимодействуют между собой с потенциальной энергией дипольного типа:

$$H = -K_1 \sum_{n,m} \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n-1,m}) - K_2 \sum_{n,m} \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n,m-1}), \quad (1)$$

где энергетическая константа K_1 описывает ориентационные взаимодействия вдоль продольного направления решетки (n), а соответствующая константа

K_2 – в поперечном направлении (m). Эти константы, характеризующие различные типы взаимодействий в системах, могут значительно отличаться друг от друга, то есть модель в общем случае является анизотропной. Величина анизотропии характеризуется параметром $\varepsilon = K_2/K_1$. Степень упорядоченности в двумерной системе определяется с помощью параметров ближнего ориентационного порядка – среднего косинуса угла между соседними ротаторами в продольном ($\mu_1 = \langle \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n-1,m}) \rangle$) и поперечном ($\mu_2 = \langle \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n,m-1}) \rangle$) направлениях решетки. При низких температурах ($k_B T/K_1 \ll 1$ и $k_B T/K_2 \ll 1$), когда ротаторы преимущественно параллельны друг другу, данную систему достаточно удовлетворительно описывает гармоническое приближение:

$$H = \frac{K_1}{2} \sum_{n,m} (\varphi_{n,m} - \varphi_{n-1,m})^2 + \frac{K_2}{2} \sum_{n,m} (\varphi_{n,m} - \varphi_{n,m-1})^2 . \quad (2)$$

В вариационном методе в потенциал низкотемпературного приближения (2) вводятся два варьируемых параметра: λ_1 и λ_2 .

$$H = \frac{\lambda_1 K_1}{2} \sum_{n,m} (\varphi_{n,m} - \varphi_{n-1,m})^2 + \frac{\lambda_2 K_2}{2} \sum_{n,m} (\varphi_{n,m} - \varphi_{n,m-1})^2 , \quad (3)$$

где параметры λ_1 и λ_2 определяются из условия минимума свободной энергии $F(\lambda_1, \lambda_2)$, которое сводится к системе, состоящей из двух уравнений:

$$\begin{cases} f_1 = \partial F / \partial \lambda_1 = 0, \\ f_2 = \partial F / \partial \lambda_2 = 0. \end{cases} \quad (4)$$

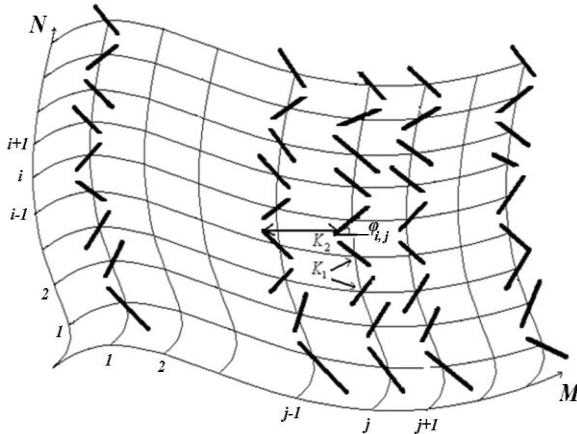


Рис. 1. Модель двумерной системы ротаторов с анизотропными ориентационными взаимодействиями

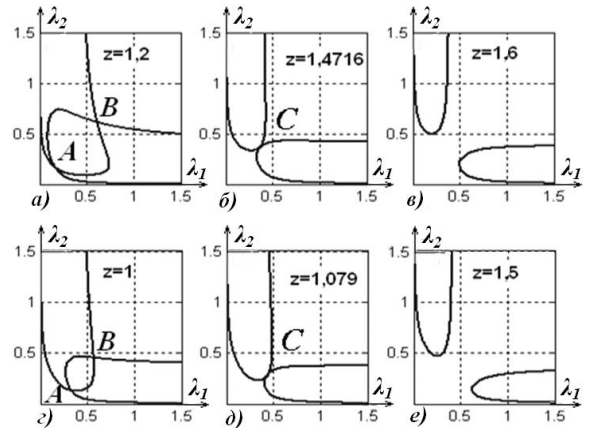


Рис. 2. Графическое решение системы уравнений (4) при различных значениях приведенной температуры $z = k_B T/K_1$ и параметра анизотропии $\varepsilon = K_2/K_1 = 1$ (a-в); 0,5 (г-е).

На рис. 2a-в приведено графическое решение системы уравнений (4) при значении параметра анизотропии $\varepsilon = 1$. Расчеты показали, что координаты точки A на рис.2a, соответствуют локальному максимуму свободной энергии,

а точки B – локальному минимуму. При увеличении температуры (параметра $z = k_B T / K_1$) точки A и B приближаются друг к другу, и при критическом значении z_c существует единственная точка пересечения кривых (рис.2б), соответствующая фазовому переходу 1-го рода в упорядоченное состояние. При значениях $z > z_c$ кривые не пересекаются, поэтому значения параметров λ_1 и λ_2 равны нулевому значению. При изменении параметра анизотропии решение получается аналогичным образом, только смещается критическая точка и кривые, соответствующие решениям уравнений (4), не являются симметричными относительно биссектрисы координатного угла (рис. 2г–е).

Для проверки правильности выбранного приближения проведено моделирование рассматриваемой системы с потенциалом (1) на основе созданного программного комплекса МК-ORDER[©] с помощью метода Монте-Карло при периодических граничных условиях. Как видно из рис. 3, значения μ_1 и μ_2 , вычисленные вариационным и компьютерным методами, совпадают вплоть до точки фазового перехода z_c .

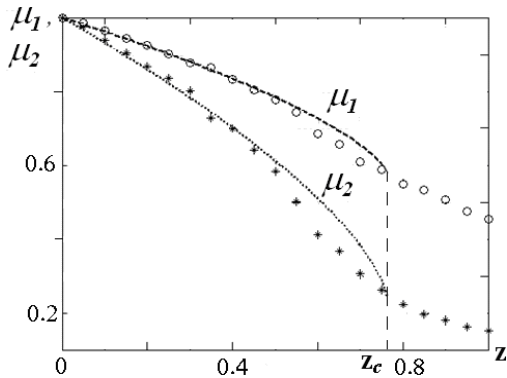


Рис. 3. Зависимости параметров ближнего ориентационного порядка (μ_1 и μ_2) в двумерной анизотропной системе ($\varepsilon = 0.2$) от приведенной температуры $z = k_B T / K_1$ вариационное приближение (1,2), компьютерное моделирование (3,4).

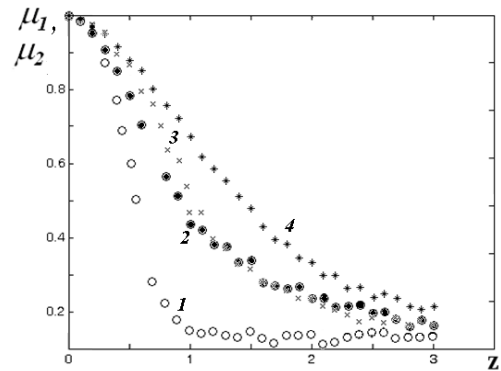


Рис. 4. Зависимости параметров ближнего ориентационного порядка μ_1 (1, 3) и μ_2 (2, 4) в двумерной анизотропной системе от приведенной температуры $z = k_B T / K_1$ при разных значениях параметра поля $h = 0$ (1, 2), $h = 1$ (3, 4).

Методом Монте-Карло было исследовано влияние электрического поля на параметры ближнего ориентационного порядка. Потенциальная энергия систем, находящихся во внешнем электрическом поле \vec{E} имеет вид:

$$H = -K_1 \sum_{n,m} \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n-1,m}) - K_2 \sum_{n,m} \cos(\varphi_{n,m} - \varphi_{n,m-1}) - pE \sum_{n,m} \cos(\varphi_{n,m}), \quad (5)$$

где E – модули напряженности электрического поля и дипольного момента p . Из рис. 4 видно, что точка фазового перехода сдвигается вправо при увеличении параметра поля $h = E \cdot p / K_1$.

В Главе 3 совместно с к.ф.-м.н., доцентом Максимовой О.Г., д.ф.-м.н., профессором Максимовым А.В. и студентами: Настулявичус А.А., Баруздиной О.С. и Байджановым А.Р. с помощью компьютерных методов изучены

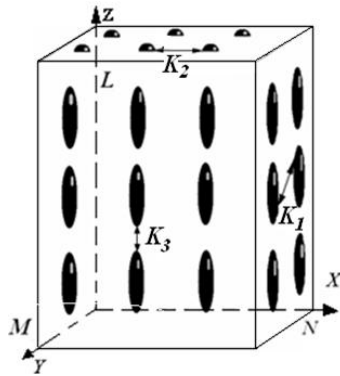


Рис.5. Модель трехмерной системы.

трехмерные системы с анизотропными ориентационными взаимодействиями. Трехмерная кубическая решетка содержит N узлов вдоль оси X , M узлов – вдоль оси Y и L узлов вдоль оси Z (рис.5). С каждым узлом связан диполь (для полимерной цепи ее гибкая или жесткая кинетическая единица), его ориентация определялась углами в сферической системе координат. Для сегнетоэлектрических систем, находящихся во внешнем электрическом поле, использовался потенциал дипольного типа:

$$H = -\sum_{i,j,k} K_1 \cos(\Phi_{i,j,k,i+1,j,k}) - \sum_{i,j,k} K_2 \cos(\Phi_{i,j,k,i,j+1,k}) - \sum_{i,j,k} K_3 \cos(\Phi_{i,j,k,i,j,k+1}) - pE \sum_{i,j,k} \cos(\varphi_{i,j,k}), \quad (6)$$

где $\Phi_{i,j,k,i+1,j,k}$ – угол между ротаторами, расположенными в соответствующих узлах решетки. Параметр дальнего ориентационного порядка определялся как:

$$\mu = \langle \cos \theta \rangle. \quad (7)$$

где θ - угол между дипольным моментом ротатора и осью преимущественного направления. Для ЖК систем применялся потенциал квадрупольного типа:

$$H = -\sum_{i,j,k} K_1 \cos^2(\Phi_{i,j,k,i+1,j,k}) - \sum_{i,j,k} K_2 \cos^2(\Phi_{i,j,k,i,j+1,k}) - \sum_{i,j,k} K_3 \cos^2(\Phi_{i,j,k,i,j,k+1}) - qE \sum_{i,j,k} \cos^2(\varphi_{i,j,k}), \quad (8)$$

для которого в качестве параметра дальнего ориентационного порядка был использован фактор Цветкова:

$$S = 1.5 \langle \cos^2 \theta \rangle - 0.5. \quad (9)$$

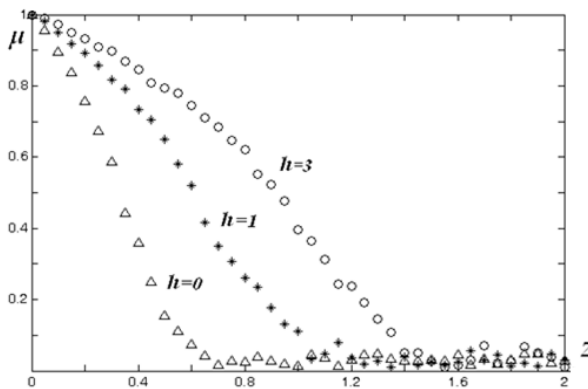


Рис. 6. Зависимости параметра дальнего дипольного ориентационного порядка μ от приведенной температуры $z = k_B T / K_1$ при разных значениях параметра поля $h = Ep/K$.

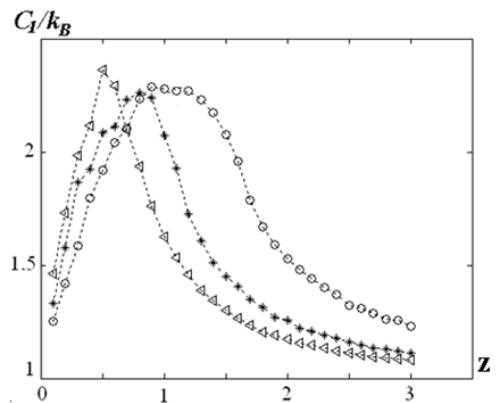


Рис. 7. Температурные зависимости теплоемкости величины C_1/k_B (в приведенных координатах) при значениях параметра анизотропии $\varepsilon=1$ (о), $0,5$ (*), $0,2$ (Δ) для систем с дипольным типом взаимодействия.

Результаты моделирования показали, что в отсутствие внешнего поля (рис.6-8), обращение в ноль параметра порядка μ (рис.6), максимумы теплоемкости C_I (рис.7) и восприимчивости χ_I (рис.8) наблюдаются при одном и том же критическом значении параметра $z_c = k_B z T_c / K_1$, что свидетельствует о существовании в рассматриваемых системах фазового перехода 2-го рода. Соответствующее значение критической температуры T_c уменьшается с уменьшением параметра анизотропии $\varepsilon = K_2 / K_1$.

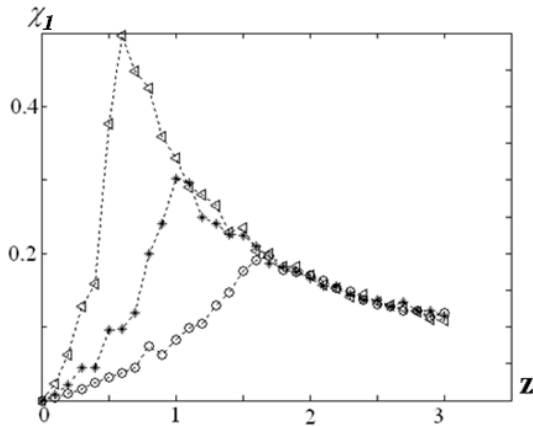


Рис. 8. Зависимости диэлектрической восприимчивости χ_I от приведенной температуры $z = k_B T / K_1$ при значениях параметра анизотропии $\varepsilon = 1$ (o), 0,5(*), 0,2(Δ) для систем с дипольным типом взаимодействия, $h=0$.

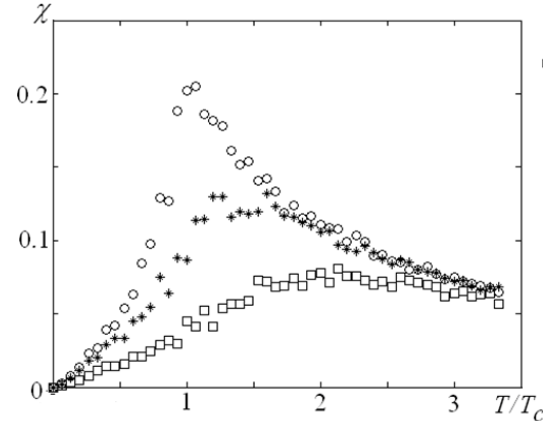


Рис. 9. Зависимость диэлектрической восприимчивости χ от приведенной температуры T/T_c при различных значениях внешнего поля $h = E \cdot p / K_1 = 0$ (o), 0,5(*), 2(\square) для систем с дипольным типом взаимодействия.

Расчеты, проведенные без учета времени релаксации (то есть при достаточно медленном нагревании) показали, что включение внешнего электрического поля ($h \neq 0$) приводит к увеличению температуры фазового перехода и к его размытию (рис.9).

При моделировании трехмерных систем в переменном электрическом поле ($e(t) = E_{max} \cos(\omega t)$) методом Монте-Карло для учета времени релаксации усреднению вдоль марковской цепи придавалась динамическая интерпретация, то есть с числом последовательных конфигураций связывалась некоторая шкала времени. На рис.10a приведены зависимости параметров дальнего ориентационного порядка для трехмерных сегнетоэлектрических систем, вычисленные с использованием классической модели Гейзенберга от напряженности электрического поля. Видно, что формы кривых гистерезиса зависят как от частоты внешнего электрического поля, так и от температуры, констант взаимодействия, амплитуды напряженности поля. Кривые гистере-

зиса для жидкокристаллических систем являются несимметричными (рис.10б). Параметр порядка S изменяется вблизи некоторого значения, которое увеличивается при повышении амплитуды внешнего поля.

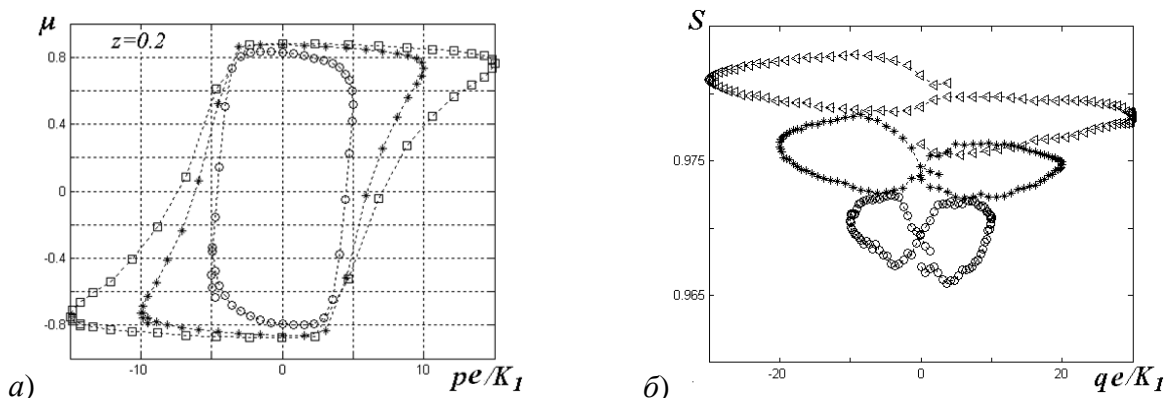


Рис. 10. Кривые гистерезиса для сегнетоэлектрических (а) и жидкокристаллических (б) систем при $z < z_c$ и различных значениях приведенной амплитуды напряженности внешнего электрического поля: а – $pE_{\max}/K_1 = 5$ (о), 10 (*), 15 (□), б – $qE_{\max}/K_1 = 10$ (о), 20 (*), 30 (Δ).

Проведено исследование зависимости комплексной составляющей диэлектрической проницаемости (площадью кривых гистерезиса на рис.10а) для сегнето- и антисегнетоэлектрических систем от частоты внешнего поля при различных значениях температуры и констант взаимодействий (рис.11). Результаты моделирования согласуются с классической теорией Друдэ-Лоренца, так как при определенной частоте внешнего поля происходит явление резонанса, для которого положение максимума слабо зависит от значений температуры и констант взаимодействий, однако высота пика увеличивается с уменьшением температуры и увеличением энергии взаимодействия между молекулами.

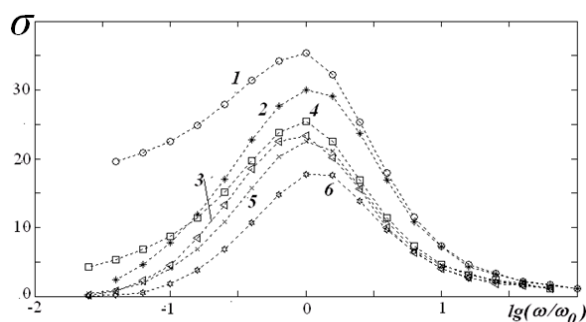


Рис. 11. Зависимости площади кривой гистерезиса σ для сегнето- (1-3) и антисегнетоэлектрических (4-6) систем от логарифма частоты внешнего поля при различных значениях приведенной температуры $z = k_B T/K_1$: 0.2(1,4), 2(2,5), 5(3,6).

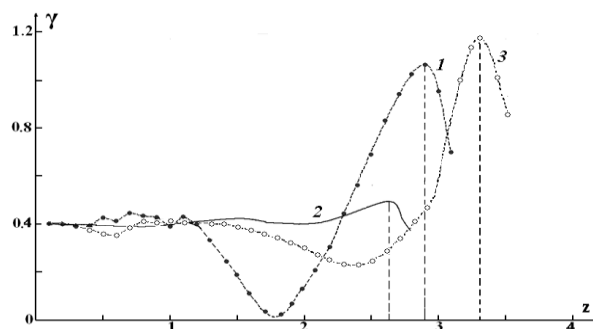


Рис. 12. Зависимости приведенной энергии поверхностного натяжения $\gamma = E/K_1$ от приведенной температуры $z = k_B T/K_1$ при различных значениях анизотропии констант взаимодействий $K_2/K_1 = 1$ (1,2), 5(3) и скоростях движения полосы металла в сушильной печи v_1 (1, 3) и v_2 (2): $v_1 < v_2$.

С помощью программного комплекса МК-ORDER[©] была исследована зависимость приведенной энергии поверхностного натяжения E_n/K_1 от величины параметра $z = k_B T/K_1$ при различном соотношении констант взаимодействий K_2 и K_1 (рис.12). Энергия поверхностного натяжения вычислялась как избыток энергии поверхностного слоя на границе раздела фаз (по сравнению с энергией вещества внутри объема тела), обусловленной различием межмолекулярных взаимодействий в обеих фазах. При максимальном значении энергии поверхностного натяжения происходит увеличение адгезии слоя и прилипание полимерного покрытия. Результаты моделирования показали, что при увеличении константы межцепного взаимодействия K_2 (например, при уменьшении концентрации растворителя) точка максимума поверхностной энергии (пиковая температура металла) смещается в сторону более высоких температур. При уменьшении скорости движения и толщины полосы металла в печи величина адгезии увеличивается.

ВЫВОДЫ

1. С помощью модифицированного вариационного приближения и компьютерного моделирования методом Монте-Карло исследована двумерная система ротаторов с анизотропными ориентационными взаимодействиями. Рассчитаны параметры ближнего ориентационного порядка, обнаружен фазовый переход 1-го рода. Показано, что значения критической температуры, вычисленные аналитическими и компьютерными методами, совпадают.
2. Проведено моделирование трехмерных систем с анизотропными взаимодействиями дипольного и квадрупольного типов. Обнаружено, что в отсутствие внешнего поля уменьшение параметра дальнего ориентационного порядка до нуля и максимальные значения теплоемкости и восприимчивости наблюдаются при одном и том же значении критической температуры, что свидетельствует о существовании фазового перехода 2-го рода.
3. С помощью компьютерного моделирования исследовано влияние внешних постоянных и переменных электрических полей на свойства фазовых переходов в двумерных и трехмерных системах ротаторов с анизотропными ориентационными взаимодействиями. Показано, что включение поля приводит к увеличению критической температуры и «размытию» фазового перехода. При определенной частоте внешнего поля

наблюдается максимум кривой гистерезиса, положение которого слабо зависит от температуры и констант ориентационных взаимодействий. Высота пика площади кривой гистерезиса возрастает с уменьшением температуры и увеличением энергии взаимодействия между частицами.

4. Исследованы поверхностные свойства полимерных покрытий металлов. Для получения максимальной адгезии необходимо достичь пиковой температуры, которая зависит от концентрации растворителя, толщины покрытия z и скорости движения полосы металла в печи. Обнаружено, что при уменьшении скорости движения листа величина адгезии увеличивается, что подтверждается данными технологических испытаний.

Основное содержание диссертации изложено в следующих работах:

1. Статьи в ведущих рецензируемых научных журналах и изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. *Петрова Т.О., Максимова О.Г., Герасимов Р.А., Максимов А.В.* Применение аналитических и компьютерных методов моделирования систем с ориентационными взаимодействиями // *Физика твердого тела*, 2012. Том 54, № 5. – С.883-884.

Petrova T.O., Maksimova O.G., Gerasimov R.A., Maksimov A.V. Application of Analytical and Numerical Methods to Simulation of Systems with Orientation Interactions // *Physics of the Solid State*, 2012. Vol. 54, No. 5. – P. 937-939.

2. *Герасимов Р.А., Максимов А.В., Петрова Т.О., Максимова О.Г.* Упорядоченность и релаксационные свойства макромолекул в сегнетоэлектрических полимерных пленках // *Физика твердого тела*, 2012. Том 54, № 5. – С.942-943.

Gerasimov R.A., Maksimov A.V., Petrova T.O., Maksimova O.G. Ordering and the Relaxation Properties of Macromolecules in Ferroelectric Polymer Films // *Physics of the Solid State*, 2012. Vol. 54, No. 5. – P. 1002-1004.

3. *Максимова О.Г., Максимов А.В., Петрова Т.О.* Исследование фазовых переходов в двумерных низко- и высокомолекулярных сегнетоэлектрических пленках // *Вестник Череповецкого государственного университета*. Череповец, 2012. Т. 2. № 4. – С. 20-23.

4. *Петрова Т.О., Максимова О.Г.* Свидетельство № 2013610009 о государственной регистрации программы для ЭВМ «МК-ORDER[©]», от 09.01.2013г.

5. *Maksimova O.G., Petrova T.O., Maksimov A.V.* Modeling of the processes of repolarization in ferroelectric and anti-ferroelectric polymer systems// *Ferroelectrics*, 2013. Vol.: 444, Issue: 01, P. 111 - 115.

6. *Максимова О.Г., Петрова Т.О., Максимов А.В.* Моделирование процессов переполяризации в сегнето- и антисегнетоэлектрических полимерных системах// *Известия РАН. Серия Физическая*, 2013. Том 77, № 8. – С.1161-1163.

Maksimova O.G., Petrova T.O., Maksimov A.V. Simulation of the Processes of Polarization Switching in Ferro- and Antiferroelectric Polymer Systems// *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*, 2013. Vol. 77, No 8. – P.1068-1070.

7. Петрова Т.О., Максимова О.Г., Соловьева Я.А., Настулявичус А.А., Баруздина О.С., Байджанов А.Р. Исследование поверхностных свойств полимерных пленок на основе PVDF покрытия // Вестник Череповецкого государственного университета. Череповец, 2013. Т. 1. № 3 (49). – С. 15-19.

2. Другие публикации:

1. Петрова Т.О., Максимова О.Г. Компьютерное моделирование жидких кристаллов // Материалы Всероссийской научно-практической конференции. Череповец, ЧГУ, 2011. Часть 3 – С. 165-167.

2. Петрова Т.О. Компьютерное моделирование систем с ориентационными взаимодействиями // Материалы конференции ВНКФСФ-17. Екатеринбург, 2011. С.142-143.

3. Петрова Т.О. Применение метода Монте-Карло для исследования сегнетоэлектрических систем // Материалы XLIX Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс». Новосибирск, 2011. - С.233.

4. Максимова О.Г., Петрова Т.О. Компьютерное моделирование сегнетоэлектрических систем // Материалы Двенадцатой международной конференции «Физика диэлектриков» (Диэлектрики - 2011). Санкт-Петербург, 2011. – С.440-442.

5. Петрова Т.О., Максимова О.Г. Применение аналитических и компьютерных методов моделирования систем с ориентационными взаимодействиями // Тезисы докладов XIX Всероссийской конференции по физике сегнетоэлектриков, Москва, 2011, - С.203.

6. Петрова Т.О., Максимова О.Г. Компьютерное моделирование полимерных систем с ориентационными взаимодействиями, находящимися во внешних электрических полях // Материалы 7-ой Санкт-Петербургской конференции молодых ученых «Современные проблемы науки о полимерах». Санкт-Петербург, 2011. – С.86.

7. Петрова Т.О., Максимова О.Г. Применение программного комплекса МК-ORDER для исследования систем с ориентационными взаимодействиями // Труды конференции-конкурса молодых физиков «Физическое образование в вузах» (Приложение). Москва, Т. 18, № 1, 2012. – С.52.

8. Петрова Т.О., Максимова О.Г. Исследование полимерных систем с ориентационными взаимодействиями, находящимися во внешних электрических полях, методами компьютерного моделирования // Сборник научных трудов «Физико-химия полимеров: синтез, свойства и применение». Тверь, Выпуск 18, 2012. – С. 114-118.

9. Maksimova O.G., Petrova T.O., Maksimov A.V. Simulation of Polarization Switching Processes in Ferro- and Liquid Crystal Polymers // Материалы 7-го Международного семинара по физике сегнетоэластиков. Воронеж, 2012.–С. 70.

10. Петрова Т.О., Максимова О.Г., Максимов А.В. Моделирование процессов переполаризации в полимерных системах // Сборник трудов I Международной Интернет-конференции. Казань, 2013. – С. 187-190.

11. Petrova T.O., Maksimova O.G., Maksimov A.V., Nastuljavichus A.A., Baruzdina O.S., Baidganov A.R. Computer Simulation of Phase Transitions, Orientational Order and Mobility in Low-and Highmolecular Ferroelectric Nano-Systems // Международная конференция TechConnect World. Вашингтон, Vol.: 2, 2013.- P. 611-614.