

Микроскопические свойства и фазовые переходы в жидкостях в условиях наноконфайнмента (пленарный доклад)

В.Н. Рыжов^{1,2}, Ю.Д. Фомин^{1,2}, Е.Н. Циок¹

¹Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

В последнее время наблюдается все возрастающий интерес к исследованиям поведения жидкостей в условиях наноконфайнмента. Это связано в первую очередь с применением этих систем в новых современных областях технологий, таких как производство наноматериалов, нанотрибология, адгезия, дизайн нанопокрывтий и т.д. Конфайнмент решающим образом влияет на многие физические и биологические явления и процессы, примерами которых могут служить структурные переходы в адсорбированных пленках, термодинамика и структурные свойства жидкостей в пористых средах и нанотрубках, течение жидкостей через нанотрубки и нанощели и т.д. Таким образом, интерес к поведению жидкостей в условиях наноконфайнмента обусловлен не только прикладными аспектами, но и в значительной мере фундаментальными проблемами поведения вещества в этих условиях. Изучение конденсированных систем в условиях конфайнмента обусловлено тем фактом, что в случае близости радиуса межмолекулярного взаимодействия и характерной длины корреляции с пространственным масштабом конфайнмента в системе могут возникать структуры и проявляться динамические свойства, которые не наблюдаются в объемных образцах. В докладе представлен обзор современного состояния исследований в данной области, в первую очередь связанных с компьютерным моделированием процессов, обусловленных наличием нескольких пространственных масштабов.

Особое внимание уделяется изучению поведения углеводородов (бензол, циклогексан) [1] и воды в условиях конфайнмента. Это связано в первую очередь с той ролью, которую вода играет в биологии (вода в биологических объектах, в контакте с протеинами, в биологических мембранах), в геологии и т.д. Как известно, в трех измерениях вода демонстрирует ряд аномальных свойств, которые могут быть объяснены в рамках модельных потенциалов с отрицательной кривизной в области отталкивания с двумя пространственными масштабами длины (см., например, [2]). В докладе подробно представлены результаты изучения плавления двумерных систем с потенциалами с отрицательной кривизной в двух измерениях, которые соответствуют

поведению системы в случае предельно узких плоских пор [3-4]. Как известно, сценарий плавления двумерных систем может принципиально отличаться от случая трех измерений. Если в трех измерениях плавление всегда происходит посредством перехода первого рода, в двумерном случае, как было показано в работах Хальперина, Нельсона и Янга [5], система может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа Березинского-Костерлица-Таулеса [6], при этом в системе возникает промежуточная гексатическая фаза, характеризующаяся квазидальним ориентационным порядком. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться. В докладе подробно проанализированы различные сценарии плавления двумерных систем, современное состояние реальных экспериментов и компьютерного моделирования в данной области. Отдельное внимание уделено зависимости сценария плавления от вида потенциала [4] и влиянию случайного пиннинга на двумерное плавление [7].

Работа поддержана грантом РФФИ 14-12-00820.

Литература

1. *Fomin Yury D., Tsiok Elena N., and Ryzhov Valentin N.*, The Behavior of Benzene Confined in Single Wall Carbon Nanotube - Journal of Computational Chemistry – 2015 – V. 36 - Issue 12 – p. 901-906.
2. *Fomin Yu. D., Gribova N. V., Ryzhov V. N., Stishov S. M., Frenkel Daan*, Quasibinary amorphous phase in a three-dimensional system of particles with repulsive-shoulder interactions. - J. Chem. Phys. – 2008 – V. 129, p. 064512.
3. *Dudalov D. E., Fomin Yu. D., Tsiok E. N., Ryzhov V. N.*, How dimensionality changes the anomalous behavior and melting scenario of a core-softened potential system? - Soft Matter – 2014 – V. 10, p. 4966.
4. *Dudalov D. E., Fomin Yu. D., Tsiok E. N., Ryzhov V. N.*, Effect of a potential softness on the solid-liquid transition in a two-dimensional core-softened potential system - J. Chem. Phys. – 2014 – V. 141 - p. 18C522.
5. *Nelson D. R., Halperin B. I.*, Dislocation-mediated melting in two dimensions – 1979 - Phys. Rev. B – V. 19, p. 2457.
6. *Kosterlitz M., Thouless D. J.*, Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems - J. Phys. C 1973 – V. 6, p. 1181.
7. *Tsiok E. N., Dudalov D. E., Fomin Yu. D., and Ryzhov V. N.*, Random pinning changes the melting scenario of a two-dimensional core-softened potential system - Phys. Rev. E – 2015 - V. 92, p. 032110.