

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Утвърдил:
(акад. В. Дренски, Директор на ИМИ-БАН)

Учебна програма
за специализиран докторантски курс

Област на висше образование:	4. Природни науки, математика и информатика
професионално направление:	4.5 Математика
докторска програма:	Математическо моделиране и приложение на математиката
тема:	Механика на въглеродни наноструктури и биомембрани
лектор:	проф. д-р Васил М. Василев
данни за връзка с лектора (тел., имейл)	+359 2 979 64 78, vasilvas@imbm.bas.bg
хорариум:	30 часа лекции
кредити съгл. кредитната система на ЦО на БАН:	20

1. Анотация

Този курс от лекции е едно въведение в континуалната механиката на въглеродните наноструктури и биомембраните. Оказва се, че въпреки твърде различна физическа и химическа природа на тези два типа нано-машабни структури, всяка една от тях може да се разглежда като двумерен еластичен континуум. Това е така, защото се наблюдава, че и двата споменати типа структури имат еластично поведение в широка област и геометрията на атомната или молекулярна им решетка, съответно, остава двумерна в континуална граница дори и след деформирането им вследствие на външни въздействия.

Конкретните проблеми, предвиждани да бъдат разгледани в курса са: механика на двумерен еластичен континуум, чието механично поведение се характеризира с няколко материални константи; аналитично описание на цилиндрични и аксиалносиметрични равновесни форми на въглеродни нано-тръбички и биомембрани, подложени на постоянно хидростатично налягане; равновесни форми на червени кръвни клетки; деформация на инжектирани клетки, прилепнали към плосък твърд субстрат; свързки на въглеродни нано-тръбички с графинов лист или други въглеродни нано-тръбички.

2. Необходими предварителни знания

Математически анализ, диференциална геометрия и диференциални уравнения в рамките на основните курсове във ФМИ на СУ.

3. Компетентности, придобити в резултат на обучението

Запознаване с основни диференциални оператори, дефинирани върху тензорни, векторни и скаларни полета, зададени върху повърхнини. Запознаване с математически модели за описание на равновесните форми и механичното поведение на клетъчни мембрани и въглеродни наноструктури. Придобиване на умения за решаване на моделите и намиране на равновесни форми на клетъчни мембрани и въглеродни наноструктури. Прилагане на придобитите знания за решаване на приложни задачи за намиране на равновесни форми на червени кръвни клетки, деформация на инжектирани клетки, прилепнали към плосък твърд субстрат и др.

4. Тематично съдържание

<i>тема</i>	<i>брой часове лекции</i>
Основи на диференциалната геометрия на повърхнини и криви	6
Основи на вариационното смятане и груповият анализ	5
Механика на двумерен еластичен континуум (непрекъснатата среда)	7
Механика на биомембрани и въглеродни наноструктури	5
Цилиндрични и аксиално-симетрични равновесни форми на биомембрани и въглеродни наноструктури	7

5. Конспект

- 1. Повърхнини в тримерно евклидово пространство:** параметризация на повърхнини; първа и втора метрична форма; гаусова и средна кривина; уравнения на Гаус-Петерсон-Кодаци; ковариантна производна и основни диференциални оператори, дефинирани върху тензорни, векторни и скаларни полета, зададени върху повърхнина в \mathbb{R}^3 (градиент, дивергенция, оператор на Лаплас-Белтрами); поток и циркулация на векторни полета; интегрални теореми (Гаус-Остроградски, Грийн-Стокс).
- 2. Криви в тримерно евклидово пространство:** параметризация; кривина, торзия и формули на Френе-Сере; равнинни криви и криви, лежащи върху зададена повърхнина – основни гео-метрични характеристики.

3. **Функционали в нормирани пространства:** основни дефиниции; вариационна производна; необходимо условие за локален екстремум; уравнения на Ойлер-Лагранж; основни теореми на функционалния анализ.
4. **Групов анализ на диференциални уравнения и вариационни проблеми:** групи на Ли от точкови преобразования; инфинитезимални генератори и алгебри на Ли; уравнение на Ли; инварианти и инвариантни многообразия; групи от преобразования на системи от уравнения; вариационни и дивергентни симетрии, теорема на Ньотер и закони за запазване.
5. **Кинематика на двумерен еластичен континуум:** основни понятия и хипотези; отчетна и актуална конфигурация, скорост и ускорение; тензор на деформация; вектор-преместване; условия за съвместимост на деформациите.
6. **Сили и напрежения в двумерен еластичен континуум:** обемни и контактни сили; тензор на напрежение; конститутивни уравнения за хомогенни и изотропни еластични тела.
7. **Уравнения за равновесие и движение на двумерен еластичен континуум:** балансни принципи; закони за запазване на маса, импулс, момент на импулса и енергия; уравнения за равновесие и движение.
8. **Механика на биомембрани:** Математически модели за описание на равновесните форми и механичното поведение на клетъчни мембрани; теория на Canham-Helfrich – вариационен функционал и уравнение за равновесие; материални параметри на структурата – спонтанна кривина и коравината на огъване.
9. **Механика на въглеродни наноструктури:** Математически модели на равновесните форми и механичното поведение на въглеродни наноструктури (нанотръбички и фулерени); теория на Tu&Ou-Yang, вариационен функционал и уравнение за равновесие.
10. **Цилиндрични равновесни форми на биологични мембрани и въглеродни нанотръбички:** Уравнение за равновесие; аналитични решения на уравнението за равновесие; праметрични уравнения на равнинни криви, генериращи цилиндрични равновесни форми при различни хидростатични натоварвания.
11. **Аксиално-симетрични равновесни форми на биомембрани и въглеродни наноструктури:** Уравнение за равновесие; аналитични решения на уравнението за равновесие; праметрични уравнения на равнинни криви, генериращи аксиално-симетрични равновесни форми при различни хидростатични натоварвания.
12. **Равновесни форми на биомембрани и въглеродни наноструктури при различни външни въздействия:** Равновесни форми на червени кръвни клетки; деформация на инжектирани клетки, прилепнали към плосък твърд субстрат; свързки на въглеродни нанотръбички с графенов лист или други въглеродни нанотръбички.

6. Препоръчана литература:

1. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, Pergamon Press, 1986.
2. C. Truesdell, *A First Course in Rational Continuum Mechanics*. Vol. 1. Academic Press, 1992.
3. I-Shih Liu, *Continuum mechanics*, Springer, 2013.
4. M. P. do Carmo, *Differential Geometry of Curves and Surfaces*, Prentice-Hall, 1976.
5. I. M. Gelfand, S. V. Fomin. *Calculus of Variations*, Prentice-Hall, 1963.
6. P. J. Olver, *Applications of Lie Groups to Differential Equations*. 2nd ed. Springer, 1993.
7. Z.-C. Ou-Yang, J.-X. Liu, Y.-Z. Xie, *Geometric Methods in the Elastic Theory of Membranes in Liquid Crystal Phases*, World Scientific, 1999.
8. Z.-C. Tu and Z.-C. Ou-Yang, Elastic theory of low-dimensional continua and its applications in bio- and nano-structures, *J. Comput. Theoret. Nanoscience* **5** (2008) 422.
9. M. D. Toda (Ed.), *Willmore Energy and Willmore Conjecture*, Chapter 3, CRC Press/Taylor & Francis Group, 2018.
10. P. B. Canham, The minimum energy of bending as a possible explanation of the biconcave shape of the human red blood cell. *J. Theor. Biol.*, **26**, 1970, 61–81.
11. W. Helfrich, Elastic properties of lipid bilayers: theory and possible experiments. *Z. Naturforsch C*, **28**, 1973, 693–703.
12. Z.-C. Ou-Yang, W. Helfrich. Bending energy of vesicle membranes: general expressions for the first, second, and third variation of the shape energy and applications to spheres and cylinders. *Phys. Rev. A*, **39**, 1989, 5280–5288.
13. V. M. Vassilev, P. A. Djondjorov, I. M. Mladenov. Cylindrical equilibrium shapes of fluid membranes. *J. Phys. A: Math. Theor.*, **41**, 2008, 435201.
14. P. A. Djondjorov, V. M. Vassilev, I. Mladenov. Analytic description and explicit parametrisation of the equilibrium shapes of elastic rings and tubes under uniform hydrostatic pressure. *Int. J. Mech. Sci.*, **53**, 2011, 355–364.

7. Критерии за оценка

Изпитът е с продължителност 4 часа и се състои от две части – писмен и устен.

На писмения изпит докторантът развива своите идеи и концепции по два въпроса от конспекта и една задача.

На устния изпит докторантът отговаря на зададени от журито въпроси, свързани с темата на курса.

Крайната оценка е от 2 до 6 (с точност до 0.5).

Тя се формира на базата на следното съответствие:

Отличен (6)	Мн.добър (5)	Добър (4)	Среден (3)	Слаб (2)
Отлично владее материала. Изложението е изчерпателно, последователно, компетентно, логично и хармонично. Правилно обосновава предлаганите решения, знае как да обобщава и излага материала без да прави грешки. Притежава необходимите умения за изпълнение на практически задачи.	Познава материала. Излага го правилно без да допуска съществени неточности. Може правилно да прилага теоретични принципи и притежава необходимите умения за изпълнение на практически задачи.	Владее голяма част от материала, но допуска неточности при изложението и отговорите на въпросите. Има известни неясноти при опитите за прилагане на материала в практически ситуации.	Владее само част от материала, но се затруднява в отделните детайли. Допуска неточности във формулировките и нарушава последователността при представянето на материал. Има затруднения при изпълнение на практически задачи.	Не познава значителна част от материала, допуска съществени грешки и с големи трудности изпълнява практически задачи.

Учебната програма е обсъдена и одобрена на заседание на секция „Математическо моделиране и числен анализ“ на 09.03.2020 г.

Ръководител секция:

(проф. д-р Нели Димитрова)

Учебната програма е разгледана от Директорския съвет на ИМИ-БАН на 12.03.2020 г. (протокол № 10).

Учебната програма е приета от Научния съвет на ИМИ-БАН на 13.03.2020 г. (протокол № 4).