

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор ІФКС НАН України
академік НАН України
Мриглод Георг Митронович



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
“Встановлення природи незвичних колективних властивостей
непорядкованих систем: Теорія та першоприципне моделювання”
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: “Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”
Регістраційний номер Проєкту: 2020.02/0115

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0115
“Встановлення природи незвичних колективних властивостей непорядкованих систем:
Теорія та першоприципне моделювання”

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу “Підтримка досліджень провідних та молодих вчених” протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

I. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок 3.11.2020 р. – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;

Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, 3,795,000 грн.

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 355,000

2-й рік 1,640,000

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 7 виконавців, з них:

доктори наук 3;

кандидати наук 0;

інші працівники 4.

Керівник проєкту (за угодою цивільно-правового характеру): Брик Тарас Михайлович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, заступник директора з наукової роботи, доктор фіз.-мат. наук;

Виконавці (усі - за угодою цивільно-правового характеру) та один асистент(за угодою цивільно-правового характеру):

Мригод Ігор Миронович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, директор, доктор фіз.-мат. наук;

Трохимчук Андрій Дмитрович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, провідний науковий співробітник, доктор фіз.-мат. наук;

Демчук Тарас Васильович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, аспірант, без ступеня;

Гордійчук Володимир Вікторович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, аспірант, без ступеня;

Копча Марія Іванівна, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, аспірант, без ступеня;

Ісенков Ілля-Микола Анджейович (асистент), Національний університет Львівська політехніка, студент магістерської програми, без ступеня.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Субвиконавців немає

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту

Мета проєкту — встановлення природи нових екзотичних проявів колективної поведінки в топологічно неспорядкованих матеріалах (зокрема, в іонних і металічних розплавах, надкритичних плинах і склоподібних системах), які можуть спостерігатись як при нормальних умовах, а також при екстремально високих тисках.

4.2. Основні завдання Проєкту

Основні завдання проєкту полягають у встановленні природи незвичних кореляцій колективної поведінки, які будуть проаналізовані як в рамках запропонованої теорії, так і з першопринципного комп'ютерного моделювання, що дозволить прослідкувати роль атомарної структури та електронної підсистеми в досліджуваних явищах. Зокрема, прояснити роль негідродинамічних теплових хвиль в колективній динаміці та можливість їх спостереження в експериментах по розсіюванню та в комп'ютерному моделюванні; провести опис та розрахунок часових кореляцій в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду, коли число молекул може флюктувати через реакцію спричиненої тиском дисоціації.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми

Сучасний стан цілої області дослідження динамічних явищ на перехресті фізики конденсованих систем/фізики м'якої речовини/статистичної фізики/гідродинаміки можна охарактеризувати як

далекий від задовільного. Велика кількість експериментальних даних та результатів моделювання часових кореляційних функцій методом класичної молекулярної динаміки знаходиться в диспропорції з мікроскопічною теорією динамічних явищ в неупорядкованих системах, яка по-суті перебуває в зародковому стані. Необхідні нові методики та підходи до дослідження незвичної колективної поведінки багаточастинкових неупорядкованих систем.

- Новизна Проекту

Принципова новизна проекту полягає у розвитку та застосуваннях оригінальної методики, що базується на комбінації методів аналітичної теорії із результатами атомістичного комп'ютерного моделювання та дозволяє кількісно досліджувати динамічні властивості структурно неупорядкованих систем, які недоступні для вивчення у традиційних підходах. Ця методика ґрунтується на ідеях методу узагальнених колективних мод і відкриває нові можливості для аналізу у широкому діапазоні зміни частот і хвильових чисел внесків від окремих типів колективних збуджень — як гідродинамічних, так і кінетичної природи — до часових кореляційних функцій.

- Методологія дослідження

Основна ідея проекту передбачає комбінацію методів аналітичної теорії та комп'ютерного моделювання, розвиток на цій основі нової методики дослідження динамічних процесів у густих шпінках і рідинах та її застосування при вивченні низки екзотичних явищ у колективній поведінці конкретних систем із структурним безладом і за умов екстремальних тисків і температур. Теоретичний опис буде ґрунтуватися на застосуваннях методу нерівноважного статистичного оператора до побудови рівнянь узагальненої гідродинаміки та ідей методу узагальнених колективних мод для отримання замкнутих рівнянь, що дозволятимуть провести розрахунок спектрів колективних збуджень і модових вкладів до часових кореляційних функцій.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ в поточному році в рамках реалізації Проекту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Згідно календарного плану досліджень на 2020 рік нами розроблялись два основні напрямки: (1) встановлення ролі не-гідродинамічних колективних процесів у динаміці простих, бінарних та іонних рідин, та (2) першопринципне моделювання водневого флюїду в широкій області тисків та встановлення особливостей автокореляційних функцій зсувного напруження в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду.

По пункту (1) робота йшла паралельно по чотирьом напрямкам: (а) дослідження моделі Коба-Андерсена бінарної рідини з композицією 80-20 для різних співвідношень мас компонент, встановлення дисперсії колективних збуджень та теплових хвиль в них. Отримання аналітичних виразів для пропаторної щільності теплових хвиль; (б) дослідження іонного розплаву NaCl та негідродинамічних колективних мод в них на основі комбінації аналітичної теорії та першопринципного моделювання; (в) теплові та інші негідродинамічні процеси в колективній динаміці надкритичного Ne; (г) теплові та інші негідродинамічні процеси в колективній динаміці квазіоднорізного флюїду твердих дисків.

В рамках досліджень моделі Коба-Андерсена (1а) враховувались два різних співвідношення мас компонент бінарної рідини з метою встановлення залежності дисперсій не-гідродинамічних оптичних мод та теплових хвиль. Встановлено внески від оптичних мод та теплових хвиль до повного динамічного структурного фактора, що дозволить експериментаторам очікувати в яких областях частот та хвильових чисел можна очікувати сигнали від таких не-гідродинамічних збуджень в експериментальних інтенсивностях розсіяння рентгенівських променів. На основі розв'язку рівнянь динаміки теплової підсистеми аналітично отримано рівняння для пропаторної щільності довгохвильових теплових хвиль. Пошук аналітичних розв'язків в рамках

термов'язкопружної моделі для бінарних рідин продовжуються через надзвичайно складні рівняння на власні значення узагальненої гідродинамічної матриці 8×8 в довгохвильовій границі. Публікація по динаміці моделі Коба-Андерсена та внесках не-гідродинамічних мод готується до друку.

Першопринципне моделювання іонного розплаву було проведено на прикладі NaCl (16). Для аналізу часових кореляцій та внесків від не-гідродинамічних збуджень було розроблено нову методику аналізу, яка полягає в розв'язуванні задачі на власні значення для узагальненої гідродинамічної матриці 8×8 , в якій матричні елементи що відповідають тепловим процесам через надзвичайно трудомістку процедуру розрахунку теплових кореляторів з першопринципного моделювання вважались підгоночними параметрами, але всі інші корелятори в'язкопружної поведінки напряму визначались з першопринципного моделювання. Невідомі параметри визначались із підгонки шести теоретичних парціальних часових кореляційних функцій густина-густина та потік-потік, що визначаються через власні значення і власні вектори узагальненої гідродинамічної матриці 8×8 , під розрахункові парціальні функції отримані напряму з першопринципного моделювання. Це є зовсім новим підходом до встановлення модових внесків з першопринципного моделювання і не має аналогів в літературі. Публікація по новій методології встановлення не-гідродинамічних мод з першопринципного моделювання готується до друку.

Коллективна динаміка надкритичних флюїдів зараз є в центрі уваги через особливості рідинного та газового типу динаміки. Однак, теоретичні моделі опису колективної динаміки надкритичних флюїдів не враховують усіх можливих внесків від не-гідродинамічних процесів. Більше того, деякі, запропоновані недавно, моделі теоретичного опису протирічать точним співвідношенням відомим як правила сум. Нами проаналізовано два такі теоретичні підходи, та показано на прикладі надкритичного Ne (1v) їх недоліки, зокрема відсутність правильного врахування не-гідродинамічних процесів таких як структурна релаксація та теплові хвилі. Результати цих досліджень постані до друку в статтях [1] та [2].

Специфічні особливості колективної динаміки флюїдів в обмеженій геометрії були досліджені на прикладі квазіодномірного флюїду твердих дисків, в якому проявляються різні типи динаміки при високій/малій густині. Були досліджені спектри колективних повздовжних та поперечних збуджень та динамічні структурні фактори теплової густини для семи різних густин квазіодномірного флюїду (1r) та встановлено область кросоверу від одного до іншого типу колективної динаміки. Результати роботи послані до друку в статті [3].

Результати досліджень за пунктом (б) календарного плану можна представити наступним чином. Методом першопринципної молекулярної динаміки проведено моделювання водневого флюїду при температурі 2500K (достатньо висока температура, коли водень можна розглядати в рамках класичної механіки) та в області тисків від 5 ГПа (традиційний молекулярний водневий флюїд) до ультрависоких 250 ГПа (металічний водень). Для восьми різних тисків в області 5-250 ГПа розраховано атмарну структуру (парні функції розподілу) та автокореляційні функції зсувного напруження, інтегрування яких по часу дозволить встановити залежність зсувної в'язкості водневого флюїду від тиску. Початкове значення (при $t=0$) таких автокореляційних функцій зсувного напруження визначає високочастотний модуль зсуву G_∞ , який є важливою характеристикою в'язкопружної поведінки досліджуваних систем. Отримано залежність високочастотного модулю зсуву від тиску $G_\infty(P)$ для водневого флюїду, яка свідчить про немонотонність в області тиску порядку 50 ГПа, яка якраз співпадає з областю переходу від молекулярного до атомарного флюїду. Це дозволить зробити висновки про екзотичну поведінку в'язкопружних ефектів в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду. Такі результати отримані вперше, бо лише застосування першопринципного комп'ютерного моделювання може допомогти розв'язати таку задачу — аналогів у науковій літературі немає. Першопринципне моделювання водневих флюїдів в області тисків 5-250 ГПа продовжується для покращення статистики усереднень по ансамблю конфігурацій. Відповідні публікації по водневому флюїду будуть підготовлені та відправлені до друку в наступному році.

- [1] T. Bryk, I. Mryglod, G. Ruocco. "Comment on "Collective modes and gapped momentum states in liquid Ga: Experiment, theory, and simulation"" - Phys. Rev. B (надіслано до друку)
- [2] T. Bryk, N. Jakse, I. Mryglod, G. Ruocco, J.-F. Wax. "Comment on "Universal effect of excitation dispersion on the heat capacity and gapped states in fluids"" - Phys. Rev. Lett. (надіслано до друку)
- [3] A. Huerta, T. Bryk, V. Pergamenschchik, A. Trokhymchuk. "Collective dynamics in quasi-one-dimensional hard disk system" - Frontiers in Physics (надіслано до друку)

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

В Проєкті розробляється нова методика аналізу часових кореляційних функцій та динамічних структурних факторів, яка, на відміну від примітивних підгоночних підходів типу згасаючого гармонічного осцилятора, дозволить прогнозувати області частот та хвильових чисел прояву не-гідродинамічних мод, що є абсолютно новою інформацією для чисельних експериментальних груп, пов'язаних з непружним розсіюванням рентгенівських променів (Франція, Японія, США) чи нейтронів (Франція, Італія). Зокрема, протягом першого року виконання Проєкту були розроблені методики аналізу колективної динаміки бінарних та іонних рідин, які можна застосовувати в комбінації з першопринципною молекулярною динамікою для визначення внесків від екзотичних не-гідродинамічних процесів (теплових хвиль, оптичних збуджень, структурної релаксації) до спостережуваних динамічних структурних факторів. Це — зовсім новий підхід, який не має аналогів у літературі. Три статті послано до друку у авторитетні міжнародні фахові видання (Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. B, Frontiers in Physics), а ще три статті знаходяться на стадії написання. Ці наукові публікації на тематику Проєкту будуть цікаві для широкого кола спеціалістів по динаміці рідин і склоподібних систем, комп'ютерному моделюванню, експериментах по непружному розсіюванню, теоретиків з галузі узагальненої гідродинаміки.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Роботи над Проєктом передбачають фундаментальні дослідження, тому практичні аспекти запланованих результатів для економіки та суспільства не передбачаються.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Нові теоретичні підходи для опису колективних явищ у неупорядкованих системах та нові методики аналізу часових кореляційних функцій з комп'ютерного моделювання, розроблені в рамках проєкту будуть представлені в навчальних курсах по статистичній фізиці та фізиці м'якої речовини та по комп'ютерному моделюванню для студентів чи аспірантів. Зокрема це стосується річного курсу "Комп'ютерне моделювання фізичних процесів" для студентів 4-го курсу НУ Львівська Політехніка, та лекції по курсу "Фізика м'якої речовини" для аспірантів ІФКС НАН України.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

заступник директора з наукової роботи ІФКС НАН України

Брик Тарас Михайлович


(підпис)