

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Директор Інституту фізики  
конденсованих систем НАН України,  
академік НАН України



Мриглод І.М.

14 грудня 2020 р.

**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**

**Плямисті колоїди у пористих середовищах:**  
**теорія та комп'ютерне моделювання**

**Назва конкурсу:** «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»  
**Реєстраційний номер Проєкту:** 2020.02/0317

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок** (реєстраційний номер та назва Проєкту) №2020.02/0317 «Плямисті колоїди у пористих середовищах: теорія та комп'ютерне моделювання»

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

**1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Тривалість виконання Проєкту

Початок – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок (27 жовтня 2020 р.)

Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн.

7 050 000 (сім мільйонів п'ятдесят тисяч)

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік: 1 270 000 (один мільйон двісті сімдесят тисяч)

2-й рік: 2 810 000 (два мільйона вісімсот десять тисяч)

3-й рік: 2 970 000 (два мільйона дев'ятсот сімдесят тисяч)

**2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

до виконання Проєкту залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 3;

кандидати наук 2;

інші працівники 1.

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

Організації-субвиконавці не залучаються

## **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

### **4.1. Мета Проєкту** (до 200 знаків):

Розвиток теоретичних підходів до опису плямистих колоїдних частинок та анізотропних колоїдів в просторових обмеженнях із притягальними стінками

### **4.2. Основні завдання Проєкту** (до 400 знаків):

- Розвиток теоретичних підходів до опису рівноважних властивостей плямистих частинок у невпорядкованій матриці пористого середовища.
- Розвиток теоретико-польового підходу для опису частинок плинину із орієнтаційно-залежною конкуруючою парною взаємодією біля плоскої притягальної стінки.
- Проведення комп'ютерного моделювання для систем плямистих колоїдів у невпорядкованій матриці та біля стінки.

### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

#### *Сучасний стан проблеми* (до 400 знаків):

Плямисті колоїди характеризуються сильною спрямованою взаємодією між окремими їх частинами – так званими патчами, що приводить до виникнення ряду особливостей у їхніх рівноважних властивостях. Попри те, що такі системи активно вивчаються протягом останнього часу, властивості плямистих колоїдних частинок у пористих середовищах залишаються мало дослідженими.

#### *Новизна Проєкту* (до 400 знаків)

Вперше, розглянуто модель плямистих колоїдів у невпорядкованій матриці пористого середовища, стінки якого, подібно до плямистих частинок, містять на собі силові центри. Також досліджено вплив невпорядкованої матриці на формування нематичної фази в системах видовжених плямистих частинок. Біля плоскої стінки, вперше, розглянуто модель колоїдів із орієнтаційно-залежною конкуруючою взаємодією.

#### *Методологія дослідження* (до 400 знаків):

Використано та розвинуто низку теоретичних методів та підходів таких, як: термодинамічна теорія збурень, асоціативна теорія рідин, теорія масштабної частинки, теорія Парсонса-Лі, теоретико-польовий підхід. Проводилися розрахунки методами комп'ютерного моделювання Монте-Карло та молекулярної динаміки. Для аналізу зв'язаності плямистих частинок використовувався алгоритм пошуку по дереву в глибину.

## **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:**

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

Перший етап проєкту, що реалізувався у 2020 р., присвячений узагальненню теоретичних підходів та методів комп'ютерного моделювання для опису основних властивостей просторово-обмежених плямистих колоїдів і пов'язаних з ними ефектів. Зокрема, запропоновано моделі згаданих систем, які враховуватимуть анізотропію системи, специфічні взаємодії між колоїдними частинками та обмежуючими поверхнями, геометрію частинок, а також розраховано низку термодинамічних і структурних властивостей таких об'єктів в пористому середовищі та біля плоскої стінки. Більш докладно, в рамках проєкту, було отримано наступне:

- проведено узагальнення багатогустинної термодинамічної теорії збурень для асоціативних рідин, теорії масштабної частинки та перколяційної теорії Флорі-Штокмаєра для врахування адсорбції плямистих колоїдів у пористому середовищі при наявності конкуренції асоціативних та дисперсійних взаємодій колоїд-колоїд та колоїд-пористе середовище. При цьому, враховувалась можливість асоціації між колоїдними частинками та пористим середовищем, що моделювалося

матрицею неупорядкованих твердих сфер, на поверхні яких, подібно до плямистих частинок, були присутні силові центри – патчі.

- на основі запропонованого узагальнення розраховано та досліджено термодинамічні властивості, зокрема – фазову поведінку ряду моделей асоціативних рідин та плямистих колоїдних частинок, адсорбованих у пористому середовищі. Такий розрахунок проведено, в тому числі, для сферичної моделі плямистих колоїдів з різною кількістю плям та для зіркоподібних колоїдних частинок.

- поєднуючи методи теорії масштабної частинки і теорії асоціативних рідин, отримано аналітичні вирази для термодинамічних характеристик плямистих колоїдів несферичної видовженої форми у неупорядкованій пористій матриці. Досліджено ступені зв'язаності частинок та фазовий перехід між ізотропним та нематичними станами в таких системах.

- розглянуто модель системи колоїдних частинок із конкуруючою парною взаємодією, що володіє також взаємною орієнтаційною залежністю частинок. Розроблено теоретичний формалізм, здатний описувати такі плинні в просторовому обмеженні біля притягальної стінки. Використовуючи теоретико-польовий підхід, отримано аналітичні вирази, які охоплюють основні властивості колоїдної системи та ефекти просторового обмеження.

- поряд із розробкою теоретичних підходів, в рамках запланованого дослідження, проводилося комп'ютерне моделювання систем плямистих частинок у неупорядкованій пористій матриці за допомогою методів Монте-Карло. Крім нього, для моделей колоїдів із конкуруючою взаємодією використовувався також і метод молекулярної динаміки. Отримано та проаналізовано низку рівноважних властивостей досліджуваних систем та проведено порівняння із запропонованими теоріями.

Отримані результати є новими та представляють особливий інтерес для наукової спільноти, яка працює в напрямку вивчення властивостей колоїдних систем, зокрема плямистих колоїдів. Задачі, які вирішувались на даному етапі, ніхто не вивчав раніше з огляду на їхню складність, хоча актуальність їх є безумовною. Адже більшість процесів, що відбуваються в реальних системах, так чи інакше пов'язані із присутністю обмежуючої поверхні. А у випадку систем колоїдних частинок в пористих середовищах можна очікувати якісно відмінну та несподівану поведінку у їхніх властивостях, що може посприяти розробці нових технологій та виготовленню нових матеріалів.

На даному етапі було також придбано обладнання у вигляді чотирьох потужних обчислювальних серверів, які є необхідними для подальшого ефективного виконання проєкту, особливо, що стосується задач по комп'ютерному моделюванню.

На сьогодні, за результатами цього етапу проєкту, підготовлено два рукописи для публікації у наукових журналах. Один із них вже опубліковано у вигляді препринту. Ще дві наукові праці знаходяться на стадії підготовки. Крім того, виконавці проєкту вже зголосилися представити їхні результати на робочій нараді (дві доповіді), яка через місяць буде проводитися в Інституті фізики конденсованих систем.

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

Незважаючи на значний розвиток теорії асоціативних рідин, впродовж останнього часу, зокрема для опису систем, що моделюються так званими плямистими частинками, практично залишалася поза увагою проблема вивчення таких систем у неупорядкованих просторових обмеженнях. Запропонований, в даному проєкті, теоретичний підхід дозволив не лише передбачати рівноважні властивості плямистих колоїдів у неупорядкованому пористому середовищі, але й враховувати притягальну та асоціативну взаємодію між частинками та стінками пор.

Перевагою, теоретичних підходів, що розвинуті в цьому проєкті на основі теорії масштабної частинки та асоціативної теорії рідин, є їх досить добра точність та, водночас, простота у

застосуванні, оскільки в рамках такої комбінації практично всі основні вирази для термодинамічних величин системи є аналітичними.

Розвиток теоретичних підходів спрямованих на вивчення термодинамічних та структурних властивостей плямистих частинок несферичної форми дасть можливість розгляду таких систем в просторових обмеженнях. Такого роду задачі є актуальними, проте до цього часу залишалися не вирішеними.

Ще одна задача, яка до цього часу не вивчалася іншими дослідниками, проте буде розглянута на цьому етапі Проєкту, це опис структурно неоднорідних систем, що володіють орієнтаційно-залежною конкуруючою взаємодією за наявності в системі просторового обмеження у вигляді плоскої стінки.

Отримані результати теорії порівнювались із даними комп'ютерного моделювання, яке проводилося в рамках Проєкту. Слід зауважити, що моделі, які вивчалися, ще не досліджувалися іншими дослідниками. Тому, результати комп'ютерного моделювання мають бути цікавими не лише в контексті теоретичних розробок виконавців проєкту, але й для широкого кола дослідників, які працюють з подібними об'єктами.

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

Дослідження, які проводилися на даному етапі Проєкту, є фундаментальними і, очевидно, отримані результати не можуть претендувати на їхнє негайне практичне застосування. Однак, на якісному рівні, висновки, що були зроблені за результатами розроблених теоретичних підходів та комп'ютерного моделювання, можуть бути корисними для отримання розуміння явищ та процесів, які спостерігаються на практиці. Тим самим, це може відкрити нові можливості до удосконалення існуючих або ж навіть створення нових технологій, особливо, що стосується плинів плямистих колоїдів та інших систем частинок із анізотропною взаємодією в умовах просторового обмеження. Розраховується, що запропоновані підходи дозволять їх подальше використання у практичних розрахунках хімічної інженерії.

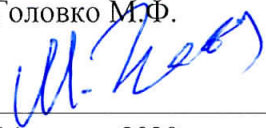
### **5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.**

Отримані результати будуть опубліковані в провідних міжнародних наукових виданнях, представлені на семінарах та конференціях. Таким чином, це дасть можливість застосування розроблених нами методик та результатів наших досліджень міжнародною спільнотою як в наукових, так і в інженерних галузях. Також, наші теоретичні розробки будуть викладатися співробітниками ІФКС НАН України в рамках їх лекцій для студентів Львівського національного університету імені Івана Франка та Національного університету "Львівська Політехніка", а також для аспірантів ІФКС НАН України.

#### **Науковий керівник Проєкту**

чл.-кор. НАН України, др. фіз.-мат. наук, гол. наук. сп., професор

Головко М.Ф.



14 грудня 2020 р.