

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор ІФКС НАН України
Тарас Брик



(підпис)
М.П.



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2021 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
“Встановлення природи незвичних колективних властивостей
невпорядкованих систем: Теорія та першопринципне моделювання”
(назва Проєкту)

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

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0115
“Встановлення природи незвичних колективних властивостей неспорядкованих систем: Теорія та першопринципне 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

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проєкту 2020 рік – 2022 рік.

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році

Початок — 7.05.2021 р. – дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки;

Закінчення – 15.12.2021 р.

Загальна вартість Проєкту, 3,711,900 грн.

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 355,000

2-й рік 1,556,900

3-й рік 1,800,000

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту залучено 7 виконавців, з них:

доктори наук 3;
кандидати наук (доктор філософії) 1;
інші працівники 3.

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

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

Мриглод Ігор Миронович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, головний науковий співробітник, 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, молодший науковий співробітник, доктор філософії (104 фізика і астрономія);

Гордійчук Володимир Вікторович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, молодший науковий співробітник, без ступеня;

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

Іленков Ілля-Микола Анджейович (асистент), Інститут фізики конденсованих систем НАН України, аспірант, без ступеня.

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

Субвиконавців немає

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту

Мета проєкту — встановлення природи нових екзотичних проявів колективної поведінки в топологічно невідповідних 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 розсіюванні 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 невідповідних

системах, яка по-суті перебуває в зародковому стані. Необхідні нові методики та підходи до дослідження незвичної колективної поведінки багаточастинкових неупорядкованих систем.

- Новизна Проєкту

Принципова новизна проєкту 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 проєкту передбачає комбінацію методів аналітичної теорії та комп'ютерного моделювання, розвиток на цій основі нової методики дослідження динамічних процесів у густих рідинах і твердих тілах 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 замкнених 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 Проєкту, зокрема:

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

Відповідно до календарного плану двох етапів на 2021 рік проводились теоретичні дослідження та комп'ютерні моделювання методом першопринципної молекулярної динаміки для ряду неупорядкованих систем: водневих флюїдів при різних тисках, металічних розплавів, іонних розплавів, розплаву заліза з домішками легких елементів для тисків і температур, характерних для зовнішньої оболонки ядра Землі, скловидних систем, квазі-одномірної моделі рідини. За результатами досліджень у 2021 році опубліковано п'ять статей [1]-[5], чотири з яких в провідних фахових журналах з квітню Q1.

Запропоновано нову методику встановлення адіабатичної (макроскопічної) швидкості звуку для рідин з класичного та першопринципного комп'ютерного моделювання, для якої не потрібна інформація про рівняння стану системи, чи складні розрахунки співвідношення теплоємностей, що дозволило суттєво спростити методику обрахунку. Тестові розрахунки для ленард-джонсівських рідин та флюїдів м'яких сфер дали чудове узгодження з відомими результатами та базою даних Національного інституту стандартів США. Нова методика була застосована до встановлення адіабатичної швидкості звуку для неупорядкованих систем, характерних для зовнішнього ядра Землі. Встановлено особливості атомарної структури в розплавах заліза з легкими домішками: C, Mg, Si, H — при тисках і температурах, характерних для зовнішнього ядра Землі. Встановлено залежності кореляцій зсувного напруження та високочастотної і макроскопічної швидкостей звуку від тиску для таких розплавів.

Досліджено зарядові структурні фактори та динамічну структуру водневого флюїду в області індукованого тиском переходу від молекулярного до атомарного флюїду. Показано, що зміна довгохвильової асимптотики зарядових структурних факторів співпадає з областю тисків, де з'являються неповністю екрановані електронною густиною іони внаслідок дисоціації водневих молекул. Вперше отримано залежність адіабатичної швидкості звуку від тиску для такого переходу з першопринципного моделювання водневих флюїдів в області тисків до 179 ГПа. Проаналізовано роль далекодії в появі колективних мод оптичного типу в іонних розплавах.

Для скловидних систем було розв'язано задачу про густину коливних станів в моделі з ангармонізмом типу Ахієзера. Задача полягала в поясненні ефекту ангармонізму коливань атомів на походження низькочастотного максимуму на коливній густині станів, відомого як "бозонний пік". Для такої задачі були отримані точні інтеграли від функцій Гріна і було показано, що в моделі із згасанням Ахієзера ангармонізми не приводять до виникнення "бозонного піку".

Досліджено задачу про особливості структурних та динамічних кореляцій у квазі-одномірній системі твердих дисків, яка моделює поведінку рідини при різних густинах у вузькому каналі. Отримано результати комп'ютерного моделювання для спаду кореляцій в такій системі, які вказують на неординарний не-експоненційний характер спаду кореляцій, що свідчить про можливість фазового переходу при високій густині в квазі-одномірному флюїді.

[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** v.103(9), 096301 (2021). Бази даних Scopus, WoS, квартиль Q1, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.096301> .

[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.** v.126(22), 229601 (2021). Бази даних Scopus, WoS, квартиль Q1, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.229601> .

[3] A. Shvaika, M. Shpot, W. Schirmacher, T. Bryk, G. Ruocco. "Comment on "Universal Origin of Boson Peak Vibrational Anomalies in Ordered Crystals and in Amorphous Materials"", **Phys. Rev. Lett.** v.126(22), 229601 (2021). Бази даних Scopus, WoS, квартиль Q1, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.179601> .

[4] A. Huerta, T. Bryk, V. Pergamenshchik, A. Trokhymchuk. "Collective dynamics in quasi-one-dimensional hard disk system", **Frontiers in Physics** v. 9, 636052 (2021). Бази даних Scopus, WoS, квартиль Q1, <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.636052> .

[5] A. Trokhymchuk, V. Pergamenshchik, A. Huerta, T. Bryk. "Reply to "Comment on Kosterlitz-Thouless-type caging-uncaging transition in a quasi-one-dimensional hard disk system". **Phys. Rev. Research** v.3(9), 038002 (2021). Бази даних Scopus, квартиль Q поки не присвоєно, <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.038002> .

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

В Проєкті розроблено нові методики отримання макроскопічної швидкості звуку та аналізу динамічних властивостей невпорядкованих систем, зокрема часових кореляційних функцій та динамічних структурних факторів, які дають необхідну інформацію для чисельних експериментальних груп, пов'язаних з непружним розсіюванням рентгенівських променів (Франція, Японія, США) чи нейтронів (Франція, Італія). Протягом другого року виконання Проєкту були розроблені методики аналізу колективної динаміки іонних рідин та молекулярних флюїдів, в яких відбувається дисоціація та можуть появлятися неекрановані електронною густиною іони. Такі методики можна застосовувати в комбінації з першопринципною молекулярною динамікою для визначення внесків від не-гідродинамічних процесів (оптичних збуджень, релаксації зсувних та об'ємних напружень, теплових мод) до спостережуваних в експериментах величин. Це новий підхід не має аналогів у літературі. В 2021 році опубліковано 5 статей у авторитетних міжнародних фахових виданнях (2- Phys.Rev.Lett, по 1- Phys.Rev.B, Frontiers in Physics, Phys.Rev.Research). 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.

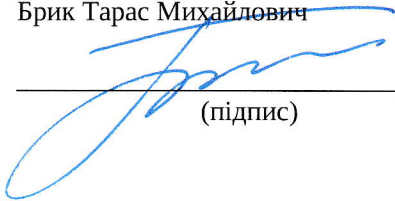
5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проекту в суспільній практиці.

Нові теоретичні підходи для опису колективних явищ у неупорядкованих системах та нові методики аналізу часових кореляційних функцій з комп'ютерного моделювання, розроблені в рамках проекту 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 Проекту

директор ІФКС НАН України
Брик Тарас Михайлович



(підпис)