

ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор Інституту фізики
конденсованих систем НАН України,

Тарас БРИК

15 грудня 2021 р.

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2021 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»
Регістраційний 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

Загальна тривалість виконання Проєкту 2020-2022 рр.
Тривалість виконання Проєкту у 2021 році
Початок – 30 квітня 2021 р.
Закінчення – 15 грудня 2021 р.

Загальна вартість Проєкту, грн.
6 907 200,00 (шість мільйонів дев'ятсот сім тисяч двісті гривень 00 копійок)

Вартість Проєкту по роках, грн.:
1-й рік: 1 270 000,00 (один мільйон двісті сімдесят тисяч гривень 00 копійок)
2-й рік: 2 667 200,00 (два мільйони шістьсот шістдесят сім тисяч двісті гривень 00 копійок)
3-й рік: 2 970 000,00 (два мільйона дев'ятсот сімдесят тисяч гривень 00 копійок)

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(І) 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 неупорядкованій матриці пористого середовища.
- Розвиток теоретико-польового підходу для опису частинок плинну із орієнтаційно-залежною конкуруючою парною взаємодією біля плоскої притягальної стінки.
- Проведення комп'ютерного моделювання для систем плямистих колоїдів у неупорядкованій 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 неупорядкованій матриці пористого середовища, стінки якого, подібно до плямистих частинок, містять на собі силові центри. Також досліджено вплив неупорядкованої 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)

У даному звіті представлено результати, що були отримані впродовж виконання Етапу 2 Проєкту у 2021 р. В ньому ми зосередились на розвитку ряду теоретичних підходів та їх застосуванні для опису орієнтаційного впорядкування в системах плямистих і видовжених колоїдних частинок в просторових обмеженнях. Зокрема було зроблено наступне:

- Проведено дослідження структурних та термодинамічних рідини двовимірних твердих еліпсоїдів з додатковим потенціалом притягання типу квадратної ями, адсорбованих у неупорядковану двовимірну твердосферну матрицю. При цьому ми детально дослідили кластеризацію та фазову (зокрема критичну) поведінку системи в залежності від параметрів моделі, таких як асферичність, ширина потенціальної ями, співвідношення розмірів матричних частинок та частинок рідини, а також співвідношення їх густин. Дослідження виконувалися на основі узагальнення та використання теорії інтегральних рівнянь та ТТЗ, представленої високотемпературним наближенням, та методів комп'ютерного моделювання. Результати

першого кроку нашого дослідження, у якому ми розглянули системи при відсутності пористого середовища будуть скоро опубліковані в Journal of Chemical Physics. По результатам нашого дослідження при наявності пористого середовища готується публікація.

- З метою опису структурних властивостей моделі дипольних плямистих колоїдів адсорбованих у пористому середовищі запропоновано узагальнення аналітичного розв'язку АССН, отримане нами раніше. Проведений розрахунок парних функцій розподілу та, на їх основі, детально досліджено вплив наявності пористого середовища і його характеристик на структурні особливості моделі. Для розрахунку термодинамічних властивостей моделі ми запропонували узагальнення термодинамічної теорії збурень, яка враховує наявність диполь-дипольних взаємодій між плямистими колоїдами, адсорбованими у пористому середовищі. Запропонований варіант ТТЗ дозволяє провести розрахунок унарної функції розподілу та дослідити вплив пористого середовища і ефектів асоціації на орієнтаційне впорядкування плямистих колоїдних частинок з додатковою диполь-дипольною взаємодією.
- Досліджено фазову поведінку плинучих частинок із конкуруючою анізотропною взаємодією у формі суми трьох потенціалів Юкави із орієнтаційно-залежним множником типу Майєра-Заупе. Модель може описувати як ізотропно-нематичний перехід так і перехід системи із мезоскопічно однорідної в мікросегреговану фазу. Ізотропно-нематичний перехід вивчався з умови мінімізації вільної енергії по параметру порядку, в той час як перехід в мезоскопічно неоднорідну фазу визначався з умови розбіжності структурного фактору при відмінних від нуля значеннях хвильового вектора. Побудовано фазову діаграму, яка дозволила окреслити термодинамічну область застосовності подальших теоретичних викладок. Така область відповідає мезоскопічно однорідній нематичній фазі.
- Здійснено дослідження структурного та орієнтаційного впорядкування плинучих частинок поблизу твердої поверхні у наближенні середнього поля. Отримано явні аналітичні вирази для профілів густини та параметра порядку, проаналізовано їхню залежність і залежність їхніх контактних значень від об'ємної густини, температури, та параметрів парного потенціалу. Показано, що профіль параметра порядку якісно відтворює поведінку профіля густини. Поблизу поверхні плин стає більш орієнтаційно впорядкованим порівняно з об'ємною областю. На відміну від ізотропного випадку, для розглянутої моделі відсутній подвійний максимум густини і не спостерігається шаруватої структури у приповерхневій області.
- На основі узагальнення теоретичних підходів, розвинутих на попередньому етапі роботи, проведено дослідження впливу параметру асиметричності плямистих сфероциліндрів та упаковки пористого середовища на ізотропно-нематичний, ізотропно-сметичний та нематично-сметичний фазові переходи плямистих колоїдів в пористих середовищах. Наявність пористого середовища зміщує фазову діаграму в область менших густин. Отримані результати добре узгоджуються з існуючими та оригінальними даними комп'ютерного моделювання.
- Виконано значний обсяг розрахунків методами комп'ютерного моделювання для систем модельних плямистих колоїдних частинок із сильно вираженою анізотропною взаємодією, що може приводити до орієнтаційного впорядкування. Зокрема, вивчено плямисті сферичні частинки із різною кількістю та розташуванням силових центрів в рамках моделі Керна-Френкеля. Для них спостережено формування ланцюжків, здатних утворювати нематик. Показано, що притягання між плямистими частинками і матрицею може руйнувати орієнтаційно впорядковану структуру. Досліджено, параметр порядку та зв'язаність в системі видовжених сфероциліндричних частинок із двома силовими центрами на кінцях при різних густинах та в умовах невпорядкованого середовища. Отримано стабільну нематичну орієнтаційно і просторово структуровану фазу частинок із орієнтаційно-залежною

конкуруючою взаємодією за допомогою адсорбуючого потенціалу. Вперше розглянуто колоїдні частинки із блокуючим парним потенціалом у неупорядкованій матриці та проаналізовано їхнє зв'язування та кластероутворення.

На сьогодні, за результатами, отриманими впродовж цього Етапу, подано до друку одну статтю в *Journal of Chemical Physics*. Ще дві статті підготовлено за матеріалами минулого етапу. Зараз вони опубліковані у вигляді препринтів на *arXiv.org* і плануються бути подані до високореєтингових журналів до кінця цього року. Ще дві статті готуються за результатами цього етапу. Крім того, за матеріалами виконаних робіт в проєкті було зроблено декілька доповідей на семінарах Інституту і відділу теорії м'якої речовини. Також був представлений постер на великій міжнародній конференції в м.Афіни (Греція), що була присвячена проблемам вивчення колоїдів та інтерфейсів (див. п.4).

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, зокрема термодинамічної теорії збурень, 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, структурних та орієнтаційних властивостей плямистих частинок, в тому числі несферичної форми, дасть можливість розгляду цих 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 із адсорбуючим потенціалом.

Крім досліджень із використанням теорії, в рамках даного проєкту проводилось комп'ютерне моделювання для низки моделей плямистих частинок та колоїдів із орієнтаційно-залежною взаємодією. Слід зауважити, що моделі, які вивчалися, ще не досліджувалися іншими дослідниками в неупорядкованих пористих середовищах. 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.

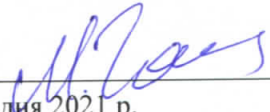
5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

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.


15 грудня 2021 р.