Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0820U100555

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Демчук Тарас Васильович

2. Demchuk Taras V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 17-12-2020

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.156.001

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 27.35.21 , 29.17.27 , 29.19.03

Тема дисертації:

1. Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках

2. Features of one-particle and collective dynamics in metal melts at ambient and high pressures

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню поведінки одночастинкової та колективної динаміки у рідких металах за нормального та високих тисків використовуючи комп'ютерне моделювання методом ab initio молекулярної динаміки. В рамках методу першопринципного комп'ютерного моделювання розглянуто ряд металів у рідкому стані, а саме, розплав Tl за нормального тиску поблизу температури плавлення, розплави Pb, In та Al вздовж лінії плавлення, та розплави Si та Na вздовж ізотерм. У методах ab initio молекулярної динаміки електронна густина розглядається явно в рамках теорії функціоналу густини. Для кожної іонної конфігурації знаходяться одночастинкові хвильові функції та електронна густина з них, що дозволяє встановити сили Геллмана-Фейнмана, які діють на іони. Такий підхід дає точніші результати при дослідженні металічних систем через можливість правильного врахування миттєвих конфігурацій іонів і

електронної густини. Переваги використання першопринципного комп'ютерного моделювання особливо помітні при дослідженні рідких металів за високих тисків. На основі отриманих з комп'ютерного експерименту даних досліджено особливості колективної динаміки систем, її кореляцію з одночастинковою, характеристики структури, а також вплив локальної структури на динаміку у розглянутих розплавах. З визначених в ході моделювання положень та швидкостей частинок розраховано часові кореляційні функції потік-потік та густина-густина. Останні пов'язані з динамічним структурним фактором — функцією, яку отримують з експериментів по непружному розсіюванню нейтронів або рентгенівських променів. Виявлено, що частотний спектр кореляційної функції поперечного потоку демонструє присутність двох піків для усіх досліджених розплавів за різних термодинамічних умов. При цьому, даний ефект спостерігається лише за великих хвильових чисел, поза межами першої псевдозони Брілюена. Дослідження присутності інтрамолекулярних зв'язків у рідкому Pb вздовж кривої плавлення у діапазоні тисків 0–70 ГПа на основі аналізу найближчих сусідів показало, що в розплаві присутні різноманітні структурні утворення, характерні для кристалічних систем. Аналіз топологічної конфігурації таких структурних утворень виявив, що за різних тисків у розплаві вони мають різну переважаючу конфігурацію. Причому, така переважаюча конфігурація відповідає структурі кристалічного Pb за відповідного тиску. Встановлено, що лише 40% з усіх виявлених структурних утворень мають притаманну рідкій фазі ікосаедричну конфігурацію. Розплав Si досліджено у діапазоні тисків 10,2–27,5 ГПа. Розраховані парні функції розподілу для рідкого Si вздовж ізотерми за різних тисків демонструють стійкість значення середньої міжатомної відстані у першій координаційній сфері. Даний результат повторює результат дослідження розплаву Si вздовж кривої плавлення у діапазоні тисків 4–23 ГПа методом дифракції рентгенівських променів. При цьому, розраховані статичні структурні фактори для усіх тисків демонструють присутність плеча біля першого максимуму. Такі дані свідчать про існування ковалентних зв'язків між атомами Si та частково тетраедричного впорядкування у широкому діапазоні тисків. Дослідження тричастинкової функції розподілу показало, що у розплаві Si присутнє тетраедричне впорядкування, яке зменшується зі зростанням тиску, в той час як притаманне рідинам ікосаедричне впорядкування збільшується зі зростанням тиску. Для встановлення особливостей одночастинкової динаміки досліджених розплавів розраховано частотні спектри автокореляційної функції швидкостей. Виявлено, що такий спектр може містити два піки за присутності двох віток на дисперсії поперечних колективних збуджень. При цьому, температура в системі не впливає на положення максимумів таких піків. Проведений аналіз частот поширення одночастинкових та колективних збуджень показав, що для усіх досліджених металів за різних термодинамічних умов положення максимумів на частотному спектрі автокореляційної функції швидкостей співпадають з характеристичними частотами поперечних колективних мод. Такий результат свідчить про прямий прояв поперечної колективної динаміки у поведінці одночастинкової динаміки рідких металів та суперечить попереднім гіпотезам, де один пік розглядався як наслідок поздовжніх мод, а другий — поперечних. Дослідження колективної динаміки рідких металів у різних термодинамічних точках дозволило встановити, що значення характеристичної частоти високочастотної вітки дисперсії поперечних колективних мод лінійно зростає зі збільшенням густини системи. При цьому показано, що дана залежність є універсальною для металічних розплавів. Більше того, виявлено, що нахил такої лінійної залежності однаковий для усіх полівалентних металів.

2. The thesis is devoted to the study of single-particle and collective dynamics in liquid metals at normal and high pressures via computer simulations within ab initio molecular dynamics. A number of metals in the liquid state, namely, the molten Tl at normal pressure near the melting temperature, liquid Pb, In and Al along the melting lines, and liquid Si and Na along some isotherms are investigated by first-principle computer modelling. In the methods of ab initio molecular dynamics the electron density is considered explicitly within the density functional theory. For each ionic configuration, one estimates one-electron wave functions and the electron density from them, which allows one to calculate the Hellman-Feynman forces acting on the ions. This approach gives more accurate results for metallic systems due to account for the instantaneous configurations of ions and electron density. The advantages of application ab initio computer modelling are especially noticeable in the study of liquid metals at high pressures. Based on the data obtained from the computer experiment, the features of the collective dynamics,

its correlation with single-particle one, the features of the structure and their effect on the dynamics in considered melts are investigated. From the trajectories and velocities of the particles determined during the modelling, current-current and density-density time correlation functions were calculated. The latter are related to the dynamic structure factor that can be measured by inelastic X-ray or neutron scattering experiments. It is found that the frequency spectrum of the correlation function of the transverse current shows the presence of two peaks for all investigated melts with different thermodynamic conditions. Besides, this effect is observed only at large wave numbers, outside the first pseudo-Brillouin zone. The study of the presence of intramolecular bonds in liquid Pb along the melting curve in the pressure range 0-70 GPa via the common neighbours analysis showed that there are various structure clusters in the melt with similar to the crystalline short-range structures. Analysis of the topological structure of such clusters shows that different predominant configuration emerges in system at different pressures. Moreover, this predominant configuration corresponds to the structure of crystalline Pb at the appropriate pressure. It was found that almost 40% of all detected structural clusters have the icosahedral configuration appropriate to liquid and glass phases. Liquid Si was investigated in the pressure range of 10.2-27.5 GPa. Pair distribution functions for liquid Si along the isotherm at different pressures were calculated. Curves show the constant value of the mean distance between the two nearest neighbours. Same result was previously obtained in the study of the Si melt along the melting curve in the pressure range of 4-23 GPa by X-ray diffraction. Besides, the calculated static structural factors for all pressures demonstrate the presence of the shoulder near the first maximum. Such data indicate the presence of covalent bonds between Si atoms and partially tetrahedral ordering in a wide range of pressures. The study of the bond-angle distribution functions showed that there is a tetrahedral ordering in molten Si, which decreases with increasing pressure, while the icosahedral ordering increases with increasing pressure. The frequency spectra of the autocorrelation velocity function were calculated in order to study the features of the single-particle dynamics of the investigated melts. It was found that such spectra may contain two peaks simultaneously with the presence of two branches in the transverse collective excitations dispersion. In addition, the temperature in the system does not make an effect on the peak maxima positions. The analysis of single-particle and collective modes frequencies showed that for all investigated metals with different thermodynamic conditions the positions of the maxima on the frequency spectrum of the velocity autocorrelation function coincide with the characteristic frequencies of transverse collective modes. This result indicates a direct manifestation of the transverse collective dynamics in the single-particle dynamics of liquid metals and contradicts with the previous hypotheses, where one peak was considered as a consequence of longitudinal modes and the second as a consequence of transverse modes. The study of the collective dynamics of liquid metals at different thermodynamic points revealed that the value of the characteristic frequency of the high-frequency transverse collective modes dispersion branch increases linearly with increasing density of the system. It is shown that such dependence is universal for all metallic melts. Moreover, it was found that the slope of such a linear dependence is the same for all polyvalent metals.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Брик Тарас Михайлович
2. Bryk Taras Mykhaylovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Плевачук Юрій Олександрович
2. Plevachuk Yuriy Olexandrovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костробій Петро Петрович
2. Kostrobij Petro P.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щур Ярослав Йосифович
2. Shchur Yaroslav Yosifovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токарчук Михайло Васильович
2. Tokarchuk Mykhailo V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Козловський Михайло Павлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Козловський Михайло Павлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.