Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U100066

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-02-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шаповал Дмитро Юрійович
2. Shapoval Dmytro Yu.

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: 02-02-2023

Спеціальність за освітою: 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 35.156.003

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: 27.35.45, 29.17, 29.19.15, 29.19.03, 31.15.27.05

Тема дисертації:

1. Кооперативні явища, скейлінґ та утворення структур у моделях реакційно-дифузійних процесів
2. Cooperative phenomena, scaling and structure formation in models of reaction-diffusion processes

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню впливу локальних флуктуацій концентрації реагуючих речовин та транспортних властивостей реагентів на зміну законів скейлінґу у реакційно-дифузійних процесах, а також впливу неоднорідних властивостей каталізатора на рівноважну поведінку утворених адсорбатів. Для досягнення поставленої мети було розв'язано декілька задач. Спочатку досліджено зміну скейлінґу при переході між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у реакційно-дифузійних системах. Такий перехід аналізується шляхом порівняння універсальної поведінки односортного коагуляційно-дифузійного процесу зі стохастичним скиданням на великих часах на одновимірному ланцюжку та ґратці Бете. На цей випадок за допомогою наближення бен-Аврагама-Ґлассера було поширено добре вивчений для одновимірних систем метод порожніх інтервалів. Знайдено логарифмічні поправки до скейлінґу густини частинок, а також розраховано перехідні скейлінґові функції та

ефективні критичні показники. Також було розглянуто двосортну систему рухомих частинок-пасток, що можуть взаємно анігілювати або коагулювати, у той час як частинки-мішені можуть адсорбуватись частинками-пастками. Аномальна дифузія частинок обидвох сортів моделюється далекосяжними стрибками типу польотів Леві. Система розглядається у дифузійно-обмеженому режимі, який досягається для просторової вимірності нижче верхньої критичної. Для дослідження скейлінґової поведінки використано метод теоретико-польової ренормалізаційної групи. Розраховано універсальні показники густини та кореляційної функції густина-густина частинок-мішеней у однопетлевому наближенні. При заміні просторової вимірності на ефективну (залежну від контролюючого параметру розподілу Леві) отримані показники можна пов'язати з аналогічними виразами для випадку звичайної дифузії. В одновимірному випадку отримані аналітичні результати для показника часового загасання густини частинок-мішеней підтверджені методом комп'ютерного експерименту. Для дослідження впливу неоднорідних властивостей каталізатора на рівноважну поведінку утворених адсорбатів, що формуються в процесі каталітично-активованих реакцій задачу було розглянуто в одновимірному та ефективно багатовимірному випадках. При цьому структура каталітичної підкладки, яка часто не є точно визначеною геометрично, розглядалась як множина рухомих або локалізованих випадково розподілених каталітичних вузлів або зв'язків між вузлами. У першій задачі досліджуються рівноважні властивості адсорбату, що формується в процесі каталітично-активованих реакцій A + B □ □ у двосортній системі на ланцюжках із каталітичними елементами (зв'язки між вузлами -- модель I та вузли -- модель II), що розміщені випадково за сценарієм відпаленого (в рівновазі із системою) та замороженого (локалізовані) безладів. У випадку одновимірних ланцюжків для обох типів каталітичних елементів та для обох типів безладу знайдено точні розв'язки. У випадку відпаленого безладу для моделей I та II отримано точні вирази для усередненої за безладом великої канонічної статистичної суми, а отже, для тиску адсорбату та його термодинамічних похідних. У випадку замороженого безладу проблему усереднення логарифма великої канонічної статистичної суми розв'язано двома підходами. У другій задачі досліджуються рівноважні властивості адсорбату у такій двосортній системі на псевдоґратках Бете та Фушімі. В цій задачі ми розширюємо модель I, де каталітичні зв'язки розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу та вважаємо, що частинки одного й того ж сорту при зустрічі на сусідніх вузлах взаємодіють одна з одною. Для двох типів псевдоґраток для симетричного випадку з рівними хімічними потенціалами частинок обох сортів та однаковою взаємодією частинок одного й того ж сорту отримано повну фазову діаграму двокомпонентного адсорбату. Показано, що фазова діаграма досить складна та складається з декількох фаз. Більш того, через свою дводольну природу на ґратці Бете існують дві додаткові фази із структурним впорядкуванням, натомість на ґратці Фушімі такі фази відсутні через більш сильні фрустраційні ефекти.

2. The thesis is devoted to the study of the influence of local fluctuations in the reactant concentration and reactant transport properties on the change in scaling laws in reaction-diffusion processes, as well as the influence of heterogeneous properties of the catalyst on the equilibrium behavior of the formed adsorbates. Achieving the set goal, several problems were solved. First, the change in scaling at the crossover between diffusion-limited and reaction-limited cooperative regimes in reaction-diffusion systems was investigated. Such a crossover is analyzed by comparing the universal behavior of a single-species coagulation-diffusion process with stochastic reset at large times on a one-dimensional chain and a Bethe lattice. For this case, the well-studied empty-interval method for one-dimensional systems was extended using the ben-Avraham-Glasser approximation. Logarithmic corrections to the scaling of the particle-density were found, as well as the crossover scaling functions and the effective critical exponents were calculated. A two-species system of mobile trap-particles that can mutually annihilate or coagulate, while target-particles can be adsorbed by traps was also considered. Anomalous diffusion of particles of both species is modeled by long-range jumps of Lévy flights type. The system is considered in the diffusion-limited regime, which is achieved for the space dimension below the upper critical one. The field-theoretic renormalization group method was used to study the scaling behavior of such a two-species system. Universal exponents for the density and the density-density correlation function of target-particles in the one-loop approximation were calculated. When replacing the space dimension with an

effective one (that depend on the control parameter of the Lévy distribution), the obtained exponents can be related to similar expressions for the case of the ordinary diffusion. In the one-dimensional case, the obtained analytical results for the density decay exponent of target-particles are confirmed by the numerical simulations. To study the influence of catalyst heterogeneous properties on the equilibrium behavior of the adsorbates formed in the process of catalytically activated reactions, the problem was considered in one-dimensional and effectively high-dimensional cases. At the same time, the structure of the catalytic substrate, which is often not precisely defined geometrically, was considered as a set of mobile or localized randomly distributed catalytic sites or bonds between sites. In the first problem, the equilibrium properties of the adsorbate formed in the process of catalytically activated reactions A + B □ □ in a two-species system on chains with catalytic elements (bonds between sites -- model I and sites -- model II), placed randomly according to the annealed disorder scenario (in equilibrium with the system) and quenched one (localized) are investigated. In the case of one-dimensional chains, exact solutions were found for both types of catalytic elements and for both types of disorder. In the case of annealed disorder for models I and II, exact expressions for the disorder-averaged grand canonical partition function and, therefore, for the adsorbate pressure and its thermodynamic derivatives were obtained. In the case of quenched disorder, the problem of averaging the logarithm of a grand canonical partition function is solved by two approaches. In the second problem, the equilibrium properties of the adsorbate in such a two-species system on Bethe and Hushimi pseudolattices are investigated. In this problem, we extend model I, where the catalytic bonds are placed randomly according to the annealed disorder scenario and consider that the same species may interact with each other when they meet at neighboring sites. For two types of pseudolattices, for the symmetric case with equal chemical potentials of both species and the same interaction of the same species, a full phase diagram of the two-component adsorbate was obtained. It is shown that the phase diagram is quite complex and consists of several phases. Moreover, due to its bipartite nature, two additional phases with structural ordering exist on the Bethe lattice, whereas on the Hushimi lattice, such phases are absent due to stronger frustration effects.

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. Дудка Максим Леонідович

2. Dudka Maxym L.

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. Пастухов Володимир Степанович
2. Pastukhov Volodymyr S.

Кваліфікація: к. 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Станиславський Олександр Олександрович
2. Stanislavsky Oleksander O

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. Держко Олег Володимирович
2. Derzhko Oleh 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ігнатюк Василь Васильович
2. Ignatyuk Vasyl V.

Кваліфікація: к. 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 Мриглод Ігор Миронович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Мриглод Ігор Миронович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Т.А.