

Pregled naučne aktivnosti dr Julija Šćepanović

Naučno istraživački rad dr Julije Šćepanović je u oblasti fizike heterogenih materijala. Za vreme doktorskih studija (2009-2014) kandidat je proučavao transportna svojstva razuređenih sistema kao što su porozni materijali, staklasti sistemi i granularni materijali. Korišćene su i razvijane numeričke simulacije modelnih gasova na dvodimenzionalnim rešetkama koje su bazirane na konceptu geometrijske frustracije. Dr Julija Šćepanović doktorirala je na temi "*Relaksaciona svojstva modela subdifuzivnog gasa na trougaonoj rešetki*" pod rukovodstvom dr Slobodana Vrhovca.

Osnovni ciljevi rada vezani su za bolje razumevanje fenomena anomalne difuzije u sistemima kao što su mikro-porozni materijali i super-ohlađene tečnosti. Subdifuzivni transport karakteriše sublinearna zavisnost srednjeg kvadratnog pomeraja čestica od vremena. Razvijen je model subdifuzivnog gasa na trougaonoj rešetki koji ima translacione i rotacione stepene slobode. Taj model je uspešno reprodukovao nekavažna svojstva staklastih sistema. Pre svega, izučavanjem Van Hove-ove korelacione funkcije pokazano je prisustvo dinamičkih heterogenosti u sistemu. Pokazano je da supresija rotacionih stepeni slobode ima važnu ulogu za pojavu subdifuzivnog režima transporta. Potpuno ukidanje rotacije omogućilo je proučavanje poroznih sistema koje karakteriše pojava "single-file" difuzije (difuzija duž kanala u kome ne može doći do mimoilaženja čestica). Relaksaciona vremena u sistemu su određivana praćenjem vremenske zavisnosti korelacione funkcije rasejanja (self-intermediate scattering function).

U skladu sa predikcijama teorije spregnutih moda dobijena je stepena divergencija vremena relaksacije korelacione funkcije rasejanja i inverznog difuzionog koeficijenta, sa istim eksponentom u oba slučaja. U slučaju objekata koji su linearni segmenti (k-meri) nije primećena pojava strukturne zarobljenosti u sistemu. Model je generalizovan tako da objekti mogu biti složene samonepresecajuće šetnje na trougaonoj rešetki, što je omogućilo analizu uticaja veličine i simetrije objekata na subdifuzivni transport, pre svega u super-ohlađenim tečnostima. Osim toga, proučavana su perkolaciona svojstva modela slučajne sekvencijalne adsorpcije složenih objekata na trougaonoj rešetki sa ciljem da ona budu dovedena u vezu sa subdifuzivnom dinamikom odgovarajućeg gasa na rešetki. Dobijeni rezultati ukazali su na to da za razne objekte iste dužine, prag za perkolacije kompaktnih objekata ima veću vrednost od praga koji odgovara izduženim, anizotropnim objektima. Nađeno je da u blizini praga za perkolacije, korelacione funkcije rasejanja iščezavaju kao stepena funkcija, za dovoljno male talasne vektore. Ispod praga za perkolacije, korelacione funkcije za velika vremena opadaju u skladu sa Kohlrausch-Williams-Watts zakonom. Za svaki proučavani objekat, vreme relaksacije sistema (gasa na rešetki) divergira kada gustina sistema teži odgovarajućoj kritičnoj gustini. Kritična gustina zavisi od geometrijskih svojstava objekta i uvek je viša od vrednosti perkolacionog praga za taj objekat. Za sve objekte, osim k-mera, kritična gustina ima vrednost manju od vrednosti gustine zagušenja (jamming density), što ukazuje na postojanje strukturne zarobljenosti sistema. Prethodno navedena dinamička svojstva sistema su u skladu sa rezultatima dobijenim u raznim modelima koji se bave formiranjem gelova.

Najvažniji rezultati objavljeni u radovima:

- Izučavanjem srednjeg kvadratnog odstupanja, došlo se do zaključka da ukidanje rotacionih stepeni slobode dovodi do subdifuzivnog ponašanja gasa u vremenima koja su između inicijalnog balističkog režima transporta i režima normalne difuzije na velikim vremenima. Razlog za pojavu subdifuzije je zarobljavanje objekata unutar tzv. kaveza, koji su dinamičke strukture formirane od okolnih čestica. Dobijeni rezultati pokazuju da međusobne korelacije u kretanju k-mera koje potiču od presecanja pravaca duž kojih se k-meri kreću u odsustvu rotacije, znatno menjaju proces kvazi-1D difuzije (SFD). Tačnije, karakter difuzije unutar mreže kanala znatno odstupa od režima SFD.
- Utvrđeno je da postoje značajne razlike u ponašanju k-mera i složenijih objekata. U slučaju linijskih segmenata, ne postoji kritična vrednost gustine manja od vrednosti najgušćeg pakovanja na kojoj se odigrava strukturno zarobljavanje. Međutim za složenije objekte koji zauzimaju čvorove koji ne leže na samo jednoj osi rešetke, dolazi do redukovanja mobilnosti. To za posledicu ima pojavu strukturne zarobljenosti na gustinama koje su manje od gustine najgušćeg pakovanja.
- Na primeru k-mera detaljno je analizirana van Hoveova korelaciona funkcija $G_s(r, t)$. Pokazano je da postoji veliko odstupanje van Hoveove funkcije od Gaussove raspodelenaročito za sisteme velikih gustina. Dobijeno je da KWW funkcija dobro opisuje ponašanje van Hoveove korelacione funkcije za srednja vremena, tj. tokom subdifuzivnog režima.