

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Добуш Оксани Андріївни
«Рівняння стану коміркової моделі плину»,
подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Робота присвячена побудові статистичної теорії та дослідженню фазової поведінки коміркової моделі плину. Тематика цієї роботи є привабливою з тієї точки зору, що властивості такої моделі вивчаються з перших принципів, не використовуючи жодних феноменологічних параметрів, а оперуючи лише мікроскопічними параметрами моделі. Подібні моделі широко використовувалися в другій половині минулого століття для опису рідинних систем в рамках канонічного ансамблю. Результати даної роботи ґрунтуються на формалізмі великого канонічного ансамблю, що дозволяє по новому зрозуміти саму модель, а також суттєво розширює можливості опису фазових переходів першого роду. Це природним чином дозволяє отримати криву співіснування рідина-пара та отримати рівняння стану. Ще однією перевагою такого підходу є можливість опису поведінки моделі поблизу критичної точки. Загальний підхід до проблеми опису на мікроскопічному рівні строгості фазового переходу першого роду в останні роки активно розвивається в роботах І. Р. Юхновського, засновника Львівської школи статистичної фізики. Вважаю, що тематика роботи і запропонований підхід до вирішення сформульованих в дисертації завдань є актуальними.

Метою даної дисертації є розвиток методу розрахунку великої статистичної суми в просторі колективних змінних, одержання термодинамічних функцій та рівняння стану коміркової моделі, а також вивчення поведінки цієї моделі в надкритичній області.

Серед найбільш вагомих результатів слід відзначити побудову ефективного

методу опису фазової поведінки системи взаємодіючих частинок із використанням коміркової моделі плину, отримання точного розв'язку моделі із взаємодією Кюрі-Вейса, встановлення наявності для неї цілого каскаду фазових переходів першого роду. Крім того дисертанткою запропоновано спосіб розрахунку рівняння стану для систем із реалістичним потенціалом взаємодії, що залежить від віддалі. При цьому здійснено як спрощений опис поведінки досліджуваної системи в широкій області температур поза критичною точкою (наближення нульової моди), так і розширений, який враховує вплив довгохвильових флуктуацій і відображає поведінку системи в безпосередньому околі критичної точки. Останній дозволив отримати криву, яка є границею розділу газоподібної та рідиноподібної структур надкритичного плину.

Дисертаційна робота виконана у відділі статистичної теорії конденсованих систем Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України. Рукопис складається зі вступу, розділу із оглядом літератури, трьох оригінальних розділів, основних висновків, переліку використаних джерел та кількох додатків. Зміст дисертації викладено на 179 сторінках друкованого тексту, з них 148 сторінок – основний текст. Список використаних джерел містить 138 найменувань.

У вступі висвітлено актуальність обраної теми, сформульовано мету та задачі дослідження, показано наукову новизну результатів, міститься інформація про апробацію роботи та особистий внесок здобувача.

У першому розділі здійснено огляд літератури, що стосується даної роботи. Обговорено методи опису фазової поведінки простих рідинних систем, а також існуючі коміркові та граткові моделі. Обґрунтовано доцільність використання великого канонічного розподілу для опису фазових переходів першого роду, включаючи надкритичну область, і, як наслідок, потреби нового формулювання коміркової моделі плину для опису фазової поведінки та розрахунку рівняння стану однокомпонентних систем взаємодіючих частинок.

Другий розділ дисертації стосується точного розрахунку великої статистичної суми та рівняння стану неперервної однокомпонентної системи із потенціалом взаємодії Кюрі-Вейса. Наведене строгое означення коміркової моделі плину як узагальнення моделі коміркового газу, у якому немає обмеження кількості частинок, що можуть перебувати в одній комірці.

Третій розділ присвячений узагальненню результатів попереднього розділу на випадок залежного від віддалі потенціалу взаємодії. Запропоновано спосіб розрахунку якобіана переходу до колективних змінних, який ґрунтуються на використанні нових, одержаних в роботі, спеціальних функції і дозволяє отримати точне функціональне представлення великої статистичної суми. Отримано термодинамічний потенціал моделі в наближенні нульової моди, на основі якого розраховані рівняння стану, крива співіснування, спінодаль в широкому діапазоні густин та температур, а також координати критичної точки.

У четвертому розділі із врахуванням флюктуацій розраховано вигляд термодинамічного потенціалу, справедливого поблизу критичної точки. Це дозволило отримати уточнені параметри критичної точки, знайти рівняння стану та ізотермічну стисливість в надкритичній області, а також побудувати лінію Відома.

Практичне значення результатів дисертаційної роботи для науки і практики визначається тим, що їх можна використати для опису фазової поведінки ряду конкретних фізичних систем. Особливо важливим є розвиток оригінального підходу до вивчення поведінки системи в надкритичній області, яка має широке застосування в промисловості.

Достовірність результатів та ступінь обґрунтованості наукових положень і висновків забезпечується використанням сучасних методів статистичної фізики, використанням апробованих математичних методів розрахунку, зокрема методу Лапласа, застосування адекватних теоретичних моделей. Результати другого

розділу містять точний розв'язок, що зустрічається далеко не в кожній дисертаційній роботі. З огляду на це, вважаю, що результати дисертаційної роботи О. А. Добуш є обґрутованими та достовірними.

Всі отримані в роботі результати доповідалися на українських та міжнародних наукових конференціях, вони опубліковані у провідних фізичних журналах, повно відображають зміст дисертації, результати досліджень та висновки. Тому вважаю, що результати дисертації достатньо добре апробовані. Число публікацій відповідає вимогам, встановленим Міністерством освіти і науки України.

Робота написана ретельно і добре читається, однак слід зробити ряд зауважень:

1. В огляді було б доцільно описати недоліки коміркової моделі рідини, що пов'язані з врахуванням далекосяжних взаємодій, які реально існують.

2. У другому розділі роботи отримано каскад фазових переходів першого роду для коміркової моделі з потенціалом Кюрі-Вейса. У наступних розділах мова йде лише про істинний фазовий перехід «газ-рідина». Варто було більш детально описати умови виходу за межі опису переходу «газ-рідина» на інші фазові переходи (другий та інші переходи в каскаді), які появляються при розрахунку моделі в другому розділі.

3. На жаль, в роботі відсутнє порівняння результатів одержаних на основі отриманого в дисертаційній роботі рівняння стану із даними інших аналітичних підходів, зокрема віріального рівняння стану, високотемпературних розкладів, розкладів за степенями густини чи активності, тощо.

4. Отримане в четвертому розділі рівняння, яке описує зв'язок густини та хімічного потенціалу розв'язано наблизено із врахуванням доданків, які вносять основний вклад поблизу критичної точки. Було б доцільно використати числові методи розв'язку і знайти область повне рівняння, наприклад, з використанням числових методів і знайти область температур, в якій наблизений і загальний розв'язок співпадають чи відрізняються.

5. Результати четвертого розділу містять громіздкі формули, які доцільно було б винести в додаток, а натомість детальніше описати особливості використання ренормгрупового методу для дослідження моделі.

6. Як завжди є зауваження до оформлення роботи, зокрема до графічного.

Автореферат дисертації написаний якісно і повністю відображає основні результати дисертаційної роботи.

Вважаю, що робота відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 №567, що висуваються до дисертацій кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, а її автор, Добуш Оксана Андріївна заслуговує присудження її наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Завідувач кафедри прикладної математики

Національного університету

“Львівська політехніка”,

доктор фізико-математичних наук,

професор


П.П. Костробій.

Підпис професора П.П. Костробія засвідчує:

Вчений секретар

Національного університету

“Львівська політехніка”

доцент


Р.Б. Брилинський

5 вересня 2019 р.

