

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Демчука Тараса Васильовича

на тему: **«Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках»**

представлену на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Актуальність теми дисертаційної роботи

Широке застосування металічних розплавів в атомній енергетиці та в технології солідифікації металів з рідкого у кристалічний чи склоподібний стани зумовлює необхідність розуміння процесів на атомарному рівні та взаємозв'язків структурних, електронних та транспортних властивостей в металічних рідинах. Зокрема, дослідження особливостей колективної динаміки металів у рідкому стані дозволяє встановити транспортні характеристики таких систем, що є важливим з точки зору використання рідких металів у якості робочої рідини теплопровідної системи у атомній енергетиці. З іншого боку, фундаментальні виклики про поведінку динаміки металічних розплавів при високих тисках дозволяють зрозуміти особливості взаємодії електронної підсистеми з іонами в екстремальних умовах, що є важливо зокрема для геофізичних задач про проходження сейсмічних хвиль через зовнішнє розплавлене ядро Землі.

Останнім часом помітно зросла кількість експериментальних досліджень, що стосуються вивчення динамічних властивостей рідких металів методом непружного розсіювання рентгенівських променів. Такі дослідження відкрили ряд нових викликів, що стосуються аналізу колективної динаміки рідких металів, зокрема, ролі в ній повздовжніх та поперечних колективних збуджень та можливості зачеплення повздовжніх та поперечних мод. При цьому, у таких експериментах відсутня можливість дослідження поперечних колективних мод, що не дозволяє повністю

встановити природу спостережувальних особливостей. А чисто аналітичні підходи для взаємодії повздовжних і поперечних мод в рідинах не є достатньо розроблені, щоб відтворити експериментальні дані. Тому, використана в дисертаційній роботі сучасна методика першопринципного комп'ютерного моделювання є правильним підходом, який комбінує мікроскопічну динаміку іонів з мінімізацією електронної енергії в рамках теорії функціоналу густини, таким чином даючи змогу відтворювати та аналізувати атомістичну структуру та динаміку конкретних розплавів.

Зважаючи на вищевказане тема дисертаційної роботи Т.В. Демчука є актуальною, оскільки застосування методу першопринципної молекулярної динаміки дозволяє вивчити роль сднчастинкових та колективних процесів у мікроскопічній динаміці металевих розплавів та їх кореляцію.

Обґрунтованість і достовірність наукових результатів наведених у дисертації, забезпечується коректністю постановки мети і завдань дослідження, застосуванням сучасних теоретичних методів дослідження динаміки рідких систем, апробацією отриманих результатів на міжнародних наукових конференціях та публікаціями у рецензованих фахових виданнях.

До найбільш вагомих **наукових результатів** автора дисертаційної роботи слід віднести наступні:

1. Встановлення присутності двох віток на дисперсії поперечних колективних мод для металів Tl, Pb, Si, In, Na та Al у широкому діапазоні тисків та температур. Зокрема, продемонстровано можливість спостереження даного ефекту за нормального тиску. При цьому, показано, що така особливість існує лише поза межами першої псевдозони Брілюена;
2. Встановлення присутності двох піків на спектрі автокореляційної функції швидкостей одночасно з спостереженням двох піків на спектрах кореляційної функції поперечного потоку за великих значень хвильового числа. Показано, що частоти обох піків на зазначених функціях попарно співпадають за усіх термодинамічних умов;

3. Встановлення факту, що хєрактеристичні частоти одночастинкових та поперечних колективних мод лінійно зростають зі зростанням густини у системі. Більше того, нахил для такої лінійної залежності хєрактеристичної частоти високочастотної вітки дисперсії поперечних колективних збуджень однаковий для усіх полівалентних металів.

Практична цінність дисертаційної роботи полягає у розширенні наукового підґрунтя щодо розуміння кореляції одночастинкової та колективної динаміки в рідких металах. Отримані результати показують універсальність особливостей поперечної колективної динаміки для рідких полівалентних металів. Результати будуть корисні для експериментального дослідження динаміки розплавів за допомогою непружного розсіювання рентгенівських променів.

Повнота викладу у наукових публікаціях, зарахованих за темою дисертації. Основні результати дисертаційної роботи достатньо повно висвітлено у 13 наукових працях, серед яких 4 статті у наукових фахових виданнях (усі опубліковані у рецензованих періодичних наукових виданнях, які входять до науково-метричних баз SCOPUS та Web of science) 1 препринт та 8 тез доповідей у збірниках матеріалів конференцій (3 всеукраїнські та 5 міжнародних).

Структура, оцінка мови, стилю та оформлення дисертації

Дисертаційна робота написано українською мовою на хорошому стилістичному рівні. Застосована у роботі наукова термінологія є загальноприйнятою, стиль викладення результатів дослідження забезпечує доступність їх сприйняття та використання.

Дисертаційна робота містить анотацію, вступ, п'ять розділів, висновки, список використаних джерел та додатки. Повний обсяг дисертації – 160 сторінок, у тому числі 131 сторінка основного тексту.

Список використаних джерел, який складається із 194 найменувань, містить як ключові публікації в науковій літературі за темою роботи, так і публікації автора, в яких викладено основні наукові результати дисертації.

В Анотації наведено узагальнений короткий виклад основного змісту дисертації, основні результати дослідження із зазначенням наукової новизни. Наводиться список публікацій здобувача за темою представленої роботи.

У Вступі обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та завдання досліджень, показано зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами, представлена наукова новизна одержаних результатів та їхнє практичне значення, наведено особистий внесок здобувача та короткий опис структури дисертації.

У першому розділі проведено огляд літератури, за тематикою дисертаційної роботи. Проаналізовано сучасні методи дослідження рідких металів за нормальних та високих тисків, обґрунтовано доцільність використання комп'ютерного експерименту з перших принципів для дослідження динаміки рідких систем. Огляд та аналіз існуючих наукових робіт за даною тематикою дозволив визначити актуальні напрямки досліджень дисертації.

У другому розділі представлено дослідження розплаву Tl за нормального тиску, поблизу температури плавлення. Встановлено існування двох віток поперечних колективних мод у другій псевдозоні Брілюена вже за нормального тиску. Проведено дослідження поздовжньої та поперечної динаміки методом підгонки суперпозиції двох внесків від згасаючих гармонічних осциляторів (damped harmonic oscillators - ДНО) та методом узагальнених гідродинамічних мод. Запропонована інтерпретація другої незвичної вітки на дисперсії колективних збуджень як внеску від теплових хвиль.

Третій розділ містить результати дослідження рідкого Pb вздовж лінії плавлення у діапазоні тисків 0-70 ГПа методом першопринципної молекулярної динаміки. За допомогою методу аналізу найближчих сусідів виявлено присутність значної кількості короткоживучих структурних утворень у системі. При цьому встановлено, що конфігурація найближчих сусідів в таких структурних утворень відповідає структурі кристалічної

гратки твердого Рb за відповідного тиску. У розділі також з аналізу одночастинкових та колективних часових кореляцій встановлено, що положення максимумів на спектрі автокореляційної функції швидкостей та характеристичні частоти двох віток дисперсії поперечних колективних мод співпадають.

У четвертому розділі наведено результати дослідження рідкого Si вздовж ізотерми 1150 K за тисків, які дозволяють моделювати розплав кремнію над мінімумом кривої плавлення. На основі аналізу парних функцій розподілу та статичних структурних факторів для різних тисків показано існування ковалентних зв'язків у системі. При цьому, еволюція кутової функції розподілу з тиском вказує на збільшення ізотропії структури зі збільшенням тиску. Досліджено еволюцію дисперсії поперечних мод та спектру автокореляційної функції швидкостей з тиском та кореляцію між ними.

П'ятий розділ містить відомості про дослідження розплавів In, Al та Na у широкому діапазоні тисків та температур, встановлення загальних особливостей колективної динаміки рідких металів за високих тисків. Показано, що для усіх досліджених металічних розплавів кількість максимумів на спектрі автокореляційної функції швидкостей співпадає з кількістю віток на кривій дисперсії поперечних колективних мод, а значення положень максимумів та характеристичних частот віток попарно співпадають за усіх досліджених термодинамічних умов. При цьому встановлено, що лінійна зміна частоти високочастотної моди поперечних колективних збуджень з густиною є універсальною властивістю металічних розплавів, а нахил такої лінійної залежності однаковий для усіх полівалентних металів.

У Висновках сформульовано основні наукові результати роботи.

Загалом позитивно оцінюючи дисертаційну роботу Т.В. Демчука можна виділити окремі **зауваження до дисертаційної роботи:**

- розрахунок та аналіз дисперсії поперечних мод проводився на основі спостереження структури піків спектральних функцій поперечного потоку, взятих лише з першопринципного моделювання. Для поперечних мод не було використано порівняння з теоретичними моделями, як це робилось, наприклад, для повздовжніх мод у розплаві талію;
- для одночастинкової динаміки також існують теоретичні підходи, які пояснюють внески від повздовжніх та поперечних збуджень через теорію взаємодіючих мод. В принципі, такий підхід міг би бути корисний для аналізу результатів першопринципного моделювання, однак не був проведений;
- на жаль, не приведено фізичного трактування лінійної залежності зміни частоти високочастотної моди поперечних колективних збуджень, характерної для металічних розплавів.

Висновки

Дисертаційна робота Т.В. Демчука є закінченою науковою роботою, в якій проведено дослідження особливостей одночастинкової та колективної динаміки ряду рідких металів у широкому діапазоні температур та тисків.

Робота виконана на достатньому рівні з застосуванням складного методу першопринципного комп'ютерного моделювання. Літературний огляд та ґрунтовність досліджень свідчать про глибоке розуміння автором обраної проблематики.

За актуальністю, науковою новизною, сукупністю одержаних результатів та практичним значенням робота «Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках» відповідає вимогам Наказу міністерства освіти і науки України №40 від 12 січня 2017р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації», та вимогам, передбаченим пунктом 10 «Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою

Кабінету Міністрів №167 від 6 березня 2019 р., а її автор заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

доктор фізико–математичних наук,
професор, завідувач кафедри
прикладної математики Національного
університету «Львівська політехніка»

П.П. Костробій

Вчений секретар Національного
університету «Львівська політехніка»
доцент



Р.Б. Брилинський