

ВІДГУК

офіційного опонента – доктора фізико-математичних наук,
професора кафедри фізики металів
Львівського національного університету імені Івана Франка
Плевачука Юрія Олександровича
на дисертаційну роботу Демчука Тараса Васильовича
на тему: **«Особливості одночастинкової та колективної динаміки в
металічних розплавах при нормальних та високих тисках»**,
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань
10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Дисертаційна робота Т.В. Демчука присвячена розв'язанню нових проблем динаміки металічних розплавів, які виникли внаслідок інтенсивного вивчення динамічної структури рідин методами непружного розсіяння рентгенівських променів протягом останнього десятиліття. Аналіз інтенсивностей розсіяння експериментальними групами, як правило, проводиться на основі спрощених моделей одного згасаючого гармонічного осцилятора (ДНО), або комбінації двох ДНО. При такому підході не можна встановити природу другого процесу, який описується додатковим згасаючим осцилятором, і, фактично постулюється його зв'язок з поперечною динамікою. Дослідження Т. В. Демчука проводились на основі першопринципного комп'ютерного моделювання, що дозволило отримувати та аналізувати реальні часові кореляції як у повздовжній, так і в поперечній динаміці металічних розплавів за довільних термодинамічних умов. Більш того, методика комп'ютерного моделювання дозволяє розрахунок одночастинкових кореляційних функцій, які не міряються безпосередньо на експерименті, однак дають важливу інформацію про взаємозв'язок одночастинкових та колективних процесів у динаміці розплавів.

Аналіз дисертаційної роботи Т.В. Демчука «Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при

нормальних та високих тисках» дозволяє сформулювати наступні висновки щодо актуальності, ступеня обґрунтованості основних наукових положень, висновків, достовірності, наукової новизни, практичного значення, а також щодо загальної оцінки роботи

Актуальність дисертації

Предметом дослідження розглянутої дисертації є рідкі одноатомні метали, чий функціональні властивості вирізняють їх серед інших речовин у рідкому стані. Зокрема, мова йде про їхню високу тепло- та електропровідність. Наукові праці останніх десятиліть вказують на можливість використання рідких металів при синтезі наноматеріалів, у сфері енергозбереження, як елементів сенсорів, біоелектродів, регульованих електронних компонентів, включаючи нові типи антен, рідини в системах охолодження, а також для виготовлення ультратонких напівпровідникових структур і багато іншого. До того ж, металічні розплави використовують безпосередньо у металургії. Такий широкий спектр застосування рідких металів робить перспективним дослідження властивостей даного класу сполук.

Іншою особливістю цієї роботи є використання у дослідженні першопринципного (*ab initio*) комп'ютерного моделювання. Даний метод дозволив автору вивчати мікроскопічну поведінку розплавів металів за дуже високих температур та тисків, де використання класичних експериментів було б трудомістким. До того ж, розгляд обраних систем з врахуванням динаміки електронної підсистеми робить дану дисертацію актуальною з точки зору фундаментальних досліджень.

Актуальність роботи підтверджується тим, що вона виконувалась відповідно до планів двох робіт в рамках держбюджетних тем НАН України, та в рамках одного міжнародного проекту.

Достовірність одержаних результатів, обґрунтованість наукових положень, висновків та рекомендацій

Наукові положення дисертації в цілому обґрунтовані, результати досліджень, а також встановлені на їхній основі висновки мають достатню обґрунтованість і достовірність. Достовірність наукових результатів, представлених у роботі, забезпечується застосуванням сучасного пакету прикладних програм VASP для проведення першопринципного комп'ютерного моделювання та теоретично обґрунтованих аналітичних методів досліджень динаміки рідин, а також апробацією отриманих результатів на міжнародних наукових конференціях та публікаціями у рецензованих фахових виданнях.

Наукова новизна отриманих результатів

Варто відмітити, що представлена автором дисертації робота є оригінальною, а розглянуті ним металічні розплави вперше досліджені за обраних термодинамічних умов методом першопринципної молекулярної динаміки з використанням теорії функціоналу електронної густини.

У ході виконання досліджень автором було отримано ряд наукових результатів, які мають необхідні ознаки наукової новизни. Серед них:

1. Встановлено існування двох віток на дисперсії поперечних колективних збуджень у короткохвильовій області для ряду металічних розплавів вже за нормального тиску у рідких полівалентних металах, а також спостереження даного ефекту за високих тисків;
2. Виявлено кореляцію між одночастинковою та колективною динамікою, яка проявляється у ідентичності характеристичних частот спектрів автокореляційної функції швидкостей та спектрів кореляційних функцій поперечного потоку у широкому діапазоні температур та тисків;
3. Встановлено універсальність залежності між характеристичною частотою високочастотної вітки дисперсії поперечних колективних збуджень та густиною системи для полівалентних металічних розплавів;

4. Виявлено наявність у розплавах Pb та Si короткоживучих структурних утворень, розглянуто можливість впливу особливостей структури системи на її динамічну поведінку.

Практичне значення отриманих результатів

Дана робота розширює розуміння колективної динаміки рідких металів, а також ставить ряд запитань до вже існуючої теорії динамічних процесів у рідинах. Отримані результати вказують на необхідність врахування електронної підсистеми у комп'ютерних експериментах, що стосуються рідких металів.

Публікація та апробація результатів дисертаційної роботи

Основні результати дисертаційної роботи достатньо повно висвітлено у 13 наукових працях, серед яких 4 статті у наукових фахових виданнях (з них 3 прореферовані в наукометричних базах Scopus та Web of science та 1 лише у Scopus) 1 препринт та 8 публікацій у матеріалах наукових конференцій (3 всеукраїнські та 5 міжнародних). Перераховані роботи достатньо повно відображають результати проведених автором досліджень.

Оформлення дисертації

Дисертація Демчука Тараса Васильовича відповідає діючим вимогам щодо оформлення дисертаційних робіт. Робота написана грамотно, послідовно та має завершену логічну структуру.

Короткий зміст роботи і її аналіз

Дисертаційна робота Т.В. Демчука загальним обсягом у 160 сторінок складається з анотації, вступу, 5 розділів, висновків, списку використаної літератури, що включає 194 посилання та додатків. Основний текст викладений на 131 сторінці, містить 50 рисунків та 5 таблиць.

Анотація містить представлення тематики роботи та огляд основних наукових результатів дослідження. Представлений список наукових публікацій автора, де висвітлені результати дисертаційної роботи.

У **Вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та завдання досліджень, показано зв'язок роботи з науковими

програмами, планами та темами, охарактеризовано наукову новизну і практичне значення результатів, наведено дані про апробацію досліджень, відзначено особистий внесок здобувача та описано структуру та обсяг дисертації.

Перший розділ містить огляд наукових праць, які стосуються теми дисертації, представлено особливості проведення першопринципного комп'ютерного експерименту. Розглянуто відомі методи аналізу динаміки рідких систем у гідродинамічній області та поза нею. Окреслено місце роботи серед сучасних досліджень.

У **Другому розділі** представлено результати дослідження розплаву Tl методом першопринципного комп'ютерного моделювання за нормального тиску неподалік від точки плавлення. Виявлено, що дисперсія поперечних колективних мод такої системи містить дві вітки за високих значень хвильового числа. Представлено дослідження поздовжніх та поперечних збуджень у рамках аналітичних моделей опису динаміки рідких систем. За допомогою GCM методу виявлено другу пропаторну моду у поздовжній динаміці системи.

Третій розділ містить результати дослідження розплаву Pb методом першопринципного комп'ютерного моделювання для семи термодинамічних точок, розташованих вздовж кривої плавлення у діапазоні тисків 0-70 ГПа. Представлено еволюцію мікроскопічної структури такої системи з тиском. Проведено аналіз найближчих сусідів для розплаву Pb за різних термодинамічних умов. Даний аналіз виявив велику кількість структурних утворень у системі. Проведене порівняння типових структур для розплаву Pb вздовж лінії плавлення з типовими структурами різних кристалічних ґраток вказує на присутність кореляції між топологією атомів у рідкій та твердій фазах.

Проведенно дослідження еволюції одночастинкової та колективної динаміки у розплаві Pb вздовж лінії плавлення. Виявлено, що дисперсія поперечних колективних мод містить дві вітки за великих значень

хвильового числа у всьому діапазоні досліджених тисків. При цьому, дані вітки поводять себе бездисперсно, так, що можна виділити їх характеристичні частоти. Виявлено, що спектр автокореляційної функції швидкостей містить два піки у всьому діапазоні досліджених тисків. Показано, що положення таких піків співпадають з зазначеними вище характеристичними частотами.

Четвертий розділ містить результати дослідження розплаву Si методом першопринципного комп'ютерного моделювання для семи термодинамічних точок, розташованих вздовж ізотерми 1150 K у діапазоні тисків 10,2-27,5 ГПа. На основі дослідження структурних особливостей даної системи автором виявлено присутність в системі ковалентних міжатомних зв'язків. При цьому, обрахована кутова функція розподілу для різних тисків виявила зменшення кількості таких зв'язків зі збільшенням тиску. Встановлено, що як і у випадку попередніх двох досліджень, дисперсія поперечних колективних мод містить дві вітки за великих значень хвильового числа у всьому діапазоні досліджених тисків.

П'ятий розділ містить результати дослідження розплавів In, Al та Na методом першопринципного комп'ютерного моделювання за тисків 0-9 ГПа, 0-300 ГПа та 0-147 ГПа відповідно. При цьому розділ містить узагальнення досліджень одночастинкової та колективної динаміки рідких металів у широкому діапазоні температур та тисків. Розраховані спектри автокореляційної функції швидкостей та спектри кореляційних функцій потік-потік для зазначених вище систем вказують на співпадіння характеристичних частот даних функцій у всьому діапазоні досліджених тисків, подібно до того, як це було виявлено для розплаву Pb. Також у цьому розділі автором виявлено лінійне зростання таких характеристичних частот зі збільшенням густини. Більше того, показано, що нахил такої лінійної залежності однаковий для усіх полівалентних металів.

Дисертаційна робота завершується загальними **висновками**, списком використаної літератури та додатками.

Зауваження до дисертаційної роботи

У представленій роботі присутні дискусійні моменти, серед яких:

1. Відсутнє пояснення розбіжності між дисперсіями теплових хвиль, представленими на рис. 2.12 (с);
2. Відсутня інформація про те, які з параметрів комп'ютерного експерименту знайдені автором, а які взяті з інших джерел для всіх проведених комп'ютерних моделювань;
3. Для розплавів In, Pb, Al, Na, Si не пояснено вибір конкретних діапазонів досліджуваних температур та тисків;
4. При дослідженні автором було застосовано як низку однакових методів дослідження усіх представлених металічних розплавів, так і низку різних методів для різних розплавів. При цьому не зрозуміло, чому певні методи як от GSM чи аналіз спільних сусідів не були застосовані для усіх розплавів;
5. Не розкрито питання про існування двох віток поперечних колективних мод строго поза межами першої псевдозони Брілюена;
6. Підписи осей на рис. 4.7. англійською мовою, в той час як легенда – українською.
7. Спектр автокореляційної функції швидкостей десь позначається як $Z(\omega)$, а десь як $Z_{VACF}(\omega)$.
8. У тексті дисертації зустрічаються поодинокі пунктуаційні та орфографічні помилки, які, зрештою, не заважають сприйняттю змісту дисертації.

Висновки

Дисертаційна робота Т.В. Демчука «Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках» є завершеною науковою роботою, в якій на високому рівні проведено дослідження властивостей одночастинкової та колективної динаміки металічних розплавів Tl, Pb, Si, Na, Al, In у широкому діапазоні температур та тисків.

Розглянута дисертаційна робота за актуальністю обраної теми, обґрунтованістю наукових положень та висновків, їх новизною, повнотою викладу в наукових публікаціях, зарахованих за темою дисертації, 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, Демчук Тарас Васильович, заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

доктор фізико–математичних наук,
професор кафедри фізики металів,
начальник науково-дослідної частини
Львівського національного
університету імені Івана Франка

Ю.О. Плевачук

Підпис Ю.О.Плевачука завіряю:

Вчений секретар



О. С. Грабовецька