

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Інституту фізики
конденсованих систем НАН України
акад. І.М.Мриглод

“06” жовтня 2020 р.



ВИТЯГ

з протоколу № 1 фахового семінару

відділу теорії м'якої речовини

Інституту фізики конденсованих систем НАН України

від 28 вересня 2020 р.

1. ПРИСУТНІ: 15 наукових працівників відділу теорії м'якої речовини, а саме:

1. Токарчук Михайло Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу;
2. Головка Мирослав Федорович, доктор фізико-математичних наук, член-кореспондент НАН України, професор, головний науковий співробітник;
3. Калюжний Юрій Володимирович, доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник.
4. Трохимчук Андрій Дмитрович, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник провідний науковий співробітник;
5. Пацаган Тарас Миколаєвич, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
6. Глушак Петро Андрійович, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
7. Кравців Іван Ярославович, кандидат фізико-математичних наук, докторант;
8. Мельник Роман Степанович, кандидат фізико-математичних наук, старший дослідник, старший науковий співробітник;
9. Дручок Максим Юрієвич, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
10. Гвоздь Тарас Валентинович, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
11. Гвоздь Марта Валентинівна, молодший науковий співробітник;
12. Шмотолоха Володимир Ігорович, молодший науковий співробітник;
13. Корвацька Марія Ярославівна, аспірант;
14. Гордійчук Володимир Вікторович, аспірант.

На засідання запрошені:

1. Брик Тарас Михайлович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем ІФКС НАН України;
2. Щур Ярослав Йосифович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник відділу квантової статистики ІФКС НАН України;

З присутніх – 7 докторів наук та 5 кандидатів наук (фахівців за профілем поданої дисертації).

Голова засідання – доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Т.М. Пацаган.

2.СЛУХАЛИ: Доповідь аспіранта відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Демчука Тараса Васильовича за матеріалами дисертаційної роботи: “Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках”, поданої на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – “Фізика і астрономія”.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Брик Тарас Михайлович.

Тему дисертації затверджено 7 лютого 2017 р. на засіданні Вченої ради Інституту фізики конденсованих систем НАН України, протокол № 5, та уточнено 31 серпня 2020 р. на засіданні Вченої ради Інституту фізики конденсованих систем НАН України, протокол № 38.

Робота виконана у відділі комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

По доповіді було задані запитання, на які доповідач дав правильні та ґрунтовні відповіді:

Д. ф.-м. н. Трохимчук А.Д.

1) Коли ви говорили про методику, то говорили що знаходиться одноелектронна хвильова функція, а з неї переходять до сил. Як це відбувається?

Відповідь: Зі знайдених одноелектронних хвильових функцій розраховують електронну густину системи. Її підставляють у рівняння для енергії як функціоналу густини. Похідна за координатами від такого функціоналу дає силу, що діє на частинку.

2) Ви говорили, що розраховуєте властивості системи вздовж лінії плавлення. Як ви знаєте параметри фазової діаграми? Ви рахуєте їх самі чи берете з літератури.

Відповідь: Фазові діаграми усіх досліджених металів знайдені з літератури.

Д. ф.-м. н. Пацаган Т.М.:

1) Ви розповідали про спостереження двох віток поперечної дисперсії для Li іншими авторами. Чи існує пояснення такого ефекту?

Відповідь: На сьогодні не існує чіткої теорії щодо даного ефекту. Розглядаються лише гіпотези, серед яких нелокальне зачеплення поздовжніх та поперечних мод, а також виникнення другої вітки поперечних колективних мод як наслідок присутності в системі короткоживучих структурних утворень.

2) На графіках ви зображаєте залежності параметрів та функцій системи P_b від температури, а чи змінювався при цьому тиск?

Відповідь: так, термодинамічні точки, де досліджувалась система P_b розташовані вздовж кривої плавлення, а, отже, як температура так і тиск в системі змінювався.

3) Чи були помічені фазові переходи типу рідина-рідина у системі Si над мінімумом фазової діаграми?

Відповідь: зміна у структурі спостерігалась з допомогою кутових функцій розподілу, але не різка. Тому, за наявними результатами ми не можемо говорити про присутність такого переходу.

4) Чи є можливість порівнювати результати дослідження поперечної динаміки з експериментальними даними?

Відповідь: Ні. Експерименти по непружному розсіюванню дозволяють досліджувати лише поздовжню динаміку.

5) Чи враховувалась далекодіюча взаємодія у вашому моделюванні?

Відповідь: Так. Вона врахована з допомогою методу Евальда.

Д. ф.-м. н. Щур Я.Й.:

1) Як ви вводили поняття псевдозон Брілюена?

Відповідь: Положення максимуму структурного фактора відповідає максимальному розсіюванню, і, по аналогії до теорії твердих тіл, таке хвильове число відповідає межі другої псевдозони Брілюена, а його половина – межі першої псевдозони Брілюена.

2) Якщо вводиться поняття псевдо зони Брілюена, то яким є співвідношення близького і далекого порядку в такій системі?

Відповідь: В рідких металах ми спостерігаємо лише ближній порядок.

3) Як ви переходили від однієї термодинамічної точки фазової діаграми до іншої?

Відповідь: Зміна температури та тиску в системі відбувалась перескальовуванням кінетичної енергії частинок та об'єму в системі відповідно. Після цього систему приводили до рівноваги і лише після цього обраховували її параметри. Таким чином, термодинамічні точки незалежні між собою

4) За якими критеріями ви оцінюєте присутність ковалентних зв'язків у системі Si?

Відповідь: Незмінне положення максимуму парної функції розподілу з тиском замість класичного його зсуву у бік менших довжин є свідченням присутності стійких міжатомних зв'язків.

К. ф.-м. н. Дручок М.Ю.:

1) На графіку, що стосується наявності типових структур, їх сума рівна 100%. Отже, для різних термодинамічних точок їх кількість може бути різною?

Відповідь: Так, їх абсолютна кількість для різних термодинамічних точок різна, а на графіку вказані нормовані на загальну кількість значення.

2) Чи можна говорити, що високе питома значення типових структур може бути зумовлене великою кількістю таких структур або ж довгим часом життя малої кількості таких структур?

Відповідь: так, обидва випадки рівноцінні з точки зору обрахунку. Ми не рахували час життя таких структур, але вважається що він є невеликим.

Д.ф.-м.н. Токарчук М.В.:

1) Чи спостерігаються якісь особливості на в'язкості як функції хвильового вектора та частоти?

Відповідь: поки що ми не рахували таких функцій, а тому відповісти на це питання не можу.

2) Чи доцільне використання формули Ейнштейна для розрахунку дифузії у системі Si зважаючи на присутність короткоживучих структур?

Відповідь: Коефіцієнт дифузії був розрахований як з допомогою формули Ейнштейна так і з допомогою формули Гріна-Кубо. Зважаючи на те що обидва розрахунки дають однаковий результат, то використання формули Ейнштейна для розрахунку дифузії у системі Si можна вважати доцільним.

Чл.-кор. НАН України Головка М.Ф.:

1) Чи можна ввести ефективний потенціал для рідких металів?

Відповідь: Так. Класичні парні потенціали для рідких металів існують, але вони містять серед внесків несферичну взаємодію, зумовлену неоднорідним розподілом електронної густини у просторі.

2) Чи присутня локалізація електронів у рідкому Si?

Відповідь: Так. Її можна досліджувати з розгляду профілів густини валентних електронів.

3. ВИСТУПИ ПРИСУТНІХ

З оцінкою дисертаційної роботи Демчука Т.В., аспіранта відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем, виступили рецензенти:

1. Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник **Щур Ярослав Йосифович**, який зазначив, що робота дуже сподобалась. Насамперед тим, що вона охоплює різні галузі фізики. Тут є і фізика рідин і фізика кристалів і є постійні порівняння з реальними об'єктами. В тому є сила роботи, що ми можемо порівнювати дані комп'ютерних симуляцій з наявними експериментальними даними. Робота була гарно представлена. Автор чітко відповідав на поставлені йому питання. Робота також містить фундаментальну проблематику, яка на сьогодні не має теоретичного пояснення. Зокрема, це стосується ефекту розщеплення поперечної гілки колективної моди коливань розплавів деяких металів. Зовні це нагадує відомий ефект поздовжньо-поперечного розщеплення коливних мод, який виявляється у йонних кристалах. Проте, в даному випадку ми маємо не кристалічне середовище, а рідкий метал. Інтерпретація цього явища потребує подальшого аналізу. Робота добре опублікована з добре поставленими задачами. Загалом, робота є фізично цікавою. Повністю підтримую дану роботу.

2 Д.ф.-м.н., професор **Токарчук Михайло Васильович**, який відзначив актуальність теми, наукову новизну і практичне значення основних результатів та висновків дисертації, особистий внесок здобувача. Зазначив, що задачі, які були поставлені, були добре розв'язані на певному рівні, виходячи із перших принципів. Досліджуються дуже цікаві об'єкти, для яких встановлені незвичні особливості. Це рідкі метали, які мають дуже широке застосування: в енергетиці, в хімічній промисловості і ін. Плюсом роботи є розгляд таких систем за високих температур та тисків. Результати досліджень одночастинкової та колективної динаміки на основі відповідних часових кореляційних функцій потоків тут отримані вперше. Методи досліджень вибрані дуже добрі тим, що це є першопринципні методи, де розглядається електрон та іонна підсистеми. Застосовується також метод узагальнених колективних мод, що гарантує достовірність результатів. Очевидна також новизна результатів, яка відмічається також у публікаціях пов'язаних з роботою. Застосування даної роботи полягає у тому, що отримані результати можуть бути використані експериментаторами та інженерами. Щодо публікацій, то робота представлена у вагомих журналах та на багатьох українських та міжнародних конференціях. Варто також відмітити і глибоке розуміння автора роботи досліджених процесів. Вважаю що дана робота готова до захисту.

Загальна характеристика дисертаційної роботи рецензентів – позитивна. Рецензенти запропонували рекомендувати дисертаційну роботу до подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді.

З оцінкою дисертаційної роботи також виступили присутні на фаховому семінарі:

Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник **Трохимчук А.Д.**: поділяю думку про те, що сьогоднішня доповідь була дуже хорошою. Хоча дана робота стосується дослідження динаміки рідких металів її фундаментальне значення важливе для ширшого кола систем. Варто відмітити різноманіття застосованих методів дослідження, зокрема застосування методу узагальнених колективних мод. Обраний метод комп'ютерного моделювання дозволив дослідити особливості структурних характеристик системи. Підтримую дану дисертацію.

Член-кореспондент НАН України, д.ф.-м.н, професор **Головко М.Ф.**: дисертант демонструє широкий кругозір, відповідає на всі поставлені запитання. Відмічу, що

дослідження є актуальними та цікавими. Вважаю, що він цілком заслуговує той ступінь на який претендує.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник Пацаган Т.М.: на мою думку робота є якісною науковою працею з хорошим, чітким та зрозумілим представленням. Рідкі метали не є простими системами і дана галузь є досить широкою. Відмічу, що обрано належний метод дослідження, який враховує ефекти, пов'язані з нерівномірним розподілом електронної густини та впливом високих тисків на неї. У роботі вивчається цілий спектр властивостей металічних систем. Публікації на належному рівні, гарні статті в хороших журналах. Підтримую дану роботу.

Виступаючи при обговоренні дали позитивну оцінку дисертації, підтвердили актуальність вирішеного наукової завдання – дослідження одночастинкової та колективної динаміки рідких металів при високих тисках на основі першопринципних методів комп'ютерного моделювання у поєднанні з методом узагальнених колективних збуджень. Представлена дисертаційна робота Демчука Т.В. відповідає кваліфікаційним вимогам, відповідає спеціальності 104 – “Фізика і астрономія”, і може бути рекомендована для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді без додаткових виправлень. Присутні на засіданні обговорили проект висновку, підготовлений рецензентами: д.ф.-м.н., пров. наук. спів. Щуром Я.Й. та д.ф.-м.н., проф. Токарчуком М.В.

З характеристикою наукової зрілості здобувач виступив науковий керівник доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Брик Т.М., який відзначив, що за час перебування в аспірантурі аспірант проявив себе як цілеспрямований, сумлінний науковий працівник, здатний вирішувати складні наукові завдання. Він на високому науковому та професійному рівні виконав великий обсяг математично-модельних досліджень та здійснив їх ґрунтовний аналіз та інтерпретацію. Аспірант досконало оволодів сучасними методами аналітичних та чисельних методів. У нього чотири публікації до наукометричних баз Web of Science та Scopus. У процесі виконання наукових досліджень та написання дисертаційної роботи здобувач досягнув високого рівня наукової компетентності та зрілості. Дисертаційна робота є актуальним і завершеним дослідженням, відповідає встановленим вимогам. За науковою зрілістю та професійними якостями здобувач Демчук Т.В. є сформованим науковцем, а його дисертаційна робота може бути подана у спеціалізовану Вчену раду Інституту.

4. Заслухавши та обговоривши доповідь Тараса Васильовича Демчука, а також за результатами попередньої експертизи представленої дисертації на фаховому семінарі відділу теорії м'якої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України, прийнято наступні висновки щодо дисертаційної роботи “Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках”:

Висновок

фахового семінару зі спеціальності відділу теорії м'якої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації “ Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках” здобувача вищої освіти ступеня доктора філософії Тараса Васильовича Демчука за спеціальністю 104 – «Фізика і астрономія»

4.1. Актуальність теми дисертації

Металічні системи, які характеризуються високою електронною теплопровідністю, є одним з найбільш розповсюджених типів матеріалів, який знайшов своє застосування у багатьох сферах людської діяльності. Окремим класом виділяють метали у рідкому стані. За рахунок високої теплопровідності порівняно з іншими рідинами, такі речовини використовують у охолоджувальних системах у техніці та як робочу рідину теплопровідної системи у енергетиці, а також у хімічних реакціях та у сфері біотехнологій.

Важливими властивостями металічних розплавів є особливості коефіцієнтів переносу та динамічна поведінка. На даний час колективна динаміка є добре зрозуміла лише у гідродинамічній області, де розглядаються великі просторові масштаби системи в порівнянні з середньою міжатомною відстанню. При цьому, про мікроскопічні процеси у динамічних явищах відомо дуже мало, тому необхідними є дослідження негідродинамічних процесів, прояв яких спостерігається, зокрема, у короткохвильовій області, де сильну роль відіграє локальне впорядкування атомів. Роботи у цьому напрямі виявляють незвичну поведінку рідких металів. Так, у дослідженні розплаву Ga методом непружного розсіювання рентгенівських променів підгонка під експериментальну криву динамічного структурного фактора вказала на присутність двох внесків від динамічних пропагаторних процесів. Незвичний другий внесок автори пропонують розглядати як сигнал від поперечних колективних збуджень. Використання першопринципного комп'ютерного експерименту дозволяє детальніше розглянути таку незвичну поведінку динаміки рідких металів. З іншої сторони, при дослідженні рідкого Li методом ab initio комп'ютерного моделювання було виявлено, що за високих тисків на частотному спектрі кореляційної функції поперечного потоку присутні два піки, що відповідає існуванню двох типів поперечних колективних збуджень, а не одного, як це спостерігається за менших тисків. Такі нетипові результати визначають необхідність подальших досліджень динаміки рідких металів. Також важливо встановити існування подібних ефектів у полівалентних металах у широкому діапазоні тисків.

4.2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри

Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України. Представлені в дисертації результати отримані згідно планів робіт в рамках бюджетних тем НАН України: “Вплив молекулярної структури і процесів локального впорядкування на фізичні властивості багаточастинкових статистичних систем” (номер держреєстрації 0114U001048, 1 кв. 2014 р. – 4 кв. 2018 р.), “Процеси впорядкування і властивості багаточастинкових статистичних систем: Теорія і

комп'ютерне моделювання" (номер держреєстрації 0119U100663, 1 кв. 2019 р. – 4 кв. 2022 р.), за підтримки конкурсного українсько-французького проекту «Виявлення нових властивостей неупорядкованих матеріалів при екстремальних умовах: Підхід ab initio моделювання» (договір № М/70-2019 від 13.06.2019, 2 кв.2019 р.-4 кв.2020 р.).

4.3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Т. М. Брик. У спільних публікаціях автору дисертації належить:

- розрахунок спектрів кореляційних функцій густина-густина, визначення кривих дисперсії поздовжніх та поперечних колективних мод [1, 2, 3, 4, 5];
- дослідження динаміки рідкого Тl методом підгонки суперпозицією двох DHO та в рамках методу узагальнених колективних мод [1];
- визначення спектру автокореляційної функції швидкостей [3, 4, 5];
- дослідження кореляції характеристичних частот одночастинкової та колективної динаміки для розплавів Pb та In [4, 5];
- розрахунок координаційного числа та коефіцієнту дифузії для розплаву Si вздовж ізотерми 1150K [5];
- проведення комп'ютерного експерименту медом першопринципної молекулярної динаміки, дослідження густини коливальних станів в рамках моделі двох фаз [4].

Обговорення та інтерпретацію отриманих результатів у публікаціях співавтори виконували разом.

4.4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Аналіз наукових результатів отриманих у дисертаційній роботі, з використанням методу першопринципної молекулярної динаміки у поєднанні із методом узагальнених колективних мод дає можливість зробити висновок про належну достовірність та обґрунтованість наукових результатів. Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертації, повністю обґрунтовано теоретичним аналізом, результатами можливого практичного використання.

4.5. Ступінь новизни основних результатів дисертаційної роботи порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Наукова новизна одержаних результатів полягає у розв'язанні наукового завдання - дослідження одночастинкової та колективної динаміки рідких металів при високих тисках на основі першопринципних методів комп'ютерного моделювання у поєднанні з методом узагальнених колективних збуджень. За результатами дисертаційної роботи вперше:

- отримані результати комп'ютерного експерименту для колективної динаміки в розплаві Tl за нормального тиску поблизу температури плавлення, в рідких Pb, In та Al вздовж лінії плавлення, в рідких Si та Na вздовж ізотерми. Виявлена присутність тетраедричного впорядкування у розплаві Si та його зменшення при зростанні тиску;
- показана присутність різноманітних короткоживучих структурних утворень у розплаві Pb та їх зміна вздовж лінії плавлення. Встановлено, що короткосяжний порядок таких структурних утворень корелює з кристалічною ґраткою твердого Pb за відповідних тисків;
- встановлено існування двох типів колективних мод на поперечних спектральних функціях у рідких металах за нормального тиску. Було показано, що кількість максимумів в частотному спектрі автокореляційної функції швидкостей рівна кількості максимумів спектральних функцій поперечного потоку з хвильовими числами у другій псевдозоні Брілюена, а частоти цих максимумів співпадають. Виявлено, що температура у системі не впливає на значення зазначених частот;
- встановлено лінійність залежності частоти високочастотної моди поперечних колективних збуджень від густини для рідких металів у широкому діапазоні тисків. Встановлено, що нахил такої лінійної залежності однаковий для усіх полівалентних металів.

4.6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

За матеріалами дисертації опубліковано 13 наукових праць, з них: 4 статті у фахових наукових виданнях [1, 2, 3, 4], 1 препринт [5] та 8 тез конференцій [6-13].

- 1) Bryk T., Demchuk T. Ab initio molecular dynamics study of collective dynamics in liquid Tl: Thermo-viscoelastic analysis // EPJ Web of Conferences. 2017. Vol. 151, P. 02001:1–9.
- 2) Bryk T., Demchuk T., Jakse N., Wax J.-F. A Search for Two Types of Transverse Excitations in Liquid Polyvalent Metals at Ambient Pressure: An Ab Initio Molecular Dynamics Study of Collective Excitations in Liquid Al, Tl, and Ni // Frontiers in Physics. 2018. Vol. 6. P. 6:1–8.
- 3) Bryk T., Demchuk T., Jakse N. Atomistic structure and collective dynamics in liquid Pb along the melting line up to 70 GPa: A first-principles molecular dynamics study // Physical Review B. 2019. Vol. 99, P. 014201:1–9.
- 4) Bryk T., Demchuk T., Wax J.-F., Jakse N. Pressure-induced effects in the spectra of collective excitations in pure liquid metals // Journal of Physics: Condensed Matter. 2020. Vol. 32, P. 184002:1–8.
- 5) Demchuk T., Bryk T., A. P. Seitsonen Structural and dynamic features of liquid Si under high pressure above the melting line minimum // arXiv preprint arXiv:2009.00834. 2020.

ТЕЗИ КОНФЕРЕНЦІЙ

- 6) Демчук Т., Брик Т. Структурні та динамічні властивості рідкого кремнію при високих тисках з ab initio комп'ютерного моделювання // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 8--9 червня, 2017. Тези доповідей. Львів, 2017. С. 30.
- 7) Demchuk T., Bryk T., Seitsonen A.P. Structure and dynamics of molten Silicon at high pressures : Ab initio molecular dynamics study // Joint conference on advanced materials and technologies: FNMA'17 and PDS'17, September 25-29, 2017, Lviv \& Yaremche, Ukraine., Book of abstracts. Lviv, 2017. P. 53.
- 8) Demchuk T., Bryk T., Seitsonen A.P. Structural and dynamical properties of liquid silicon at high pressures via ab initio molecular dynamics // Ulam Computer Simulations Workshop. Challenges \& Opportunities in Molecular Simulations. June 21-24, 2017, Lviv, Ukraine. Book of abstracts. Lviv, 2017. P. 29.
- 9) Демчук Т., Брик Т. Атомарна структура та колективна динаміка рідкого Рb вздовж лінії плавлення //XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 7–8 червня, 2018. Тези доповідей. Львів, 2018. С. 34.
- 10) Демчук Т., Брик Т. Зсувні напруження та колективні збудження у рідкому In: ab initio комп'ютерні симуляції //XIX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 13–14 червня, 2019. Тези доповідей. Львів, 2019. С. 24.
- 11) Demchuk T., Bryk T. Shear stress correlations and collective excitations in in liquid In via ab initio computer simulations // 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications, July 3–6, 2019, Lviv, Ukraine. Book of abstracts. Lviv, 2019. P. 97.
- 12) Demchuk T., Bryk T. Features of collective dynamics in liquid In along the melting line up to 10GPa // 17-th International Conference on Liquid and Amorphous Metals, August 26-30, 2019, Lyon, France., July 3--6, 2019, Book of abstracts. Lyon, 2019. P. 120.
- 13) Bryk T., Jakse N., Demchuk T. Pressure-induced effects in the dispersion of collective excitations in polyvalent liquid metals // 17-th International Conference on Liquid and Amorphous Metals, August 26-30, 2019, Lyon, France., July 3–6, 2019, Book of abstracts. Lyon, 2019. P. 138.

4.7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозиумах, семінарах тощо

Результати дисертаційної роботи доповідались і опубліковані в матеріалах таких наукових конференцій: Ulam Computer Simulations Workshop; Challenges Opportunities in Molecular Simulations (Львів, 2017), Joint conference on advanced materials and technologies: FNMA'17 and PDS'17 (Львів, 2017), 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Львів, 2019 р.), 17-th International Conference on Liquid and Amorphous Metals (Ліон, Франція, 2019), XVII, XVIII та XIX Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2017, 2018 та 2019 рр.), а також на семінарах у Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

4.8. Наукове значення виконаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів в програмі навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

Наукова цінність результатів дисертаційної роботи полягає у описі одночастинкової та колективної динаміки рідких металів при високих тисках на основі першопринципних методів комп'ютерного моделювання у поєднанні з методом узагальнених колективних збуджень. На основі такого підходу вперше встановлена лінійність залежності частоти високочастотної моди поперечних колективних збуджень від густини для рідких металів у широкому діапазоні тисків. Встановлено, що нахил такої лінійної залежності однаковий для усіх полівалентних металів. Це фундаментальний результат. Крім цього, вперше встановлено існування двох типів колективних мод на поперечних спектральних функціях у рідких металах за нормального тиску.

4.9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства, або галузі народного господарства, де вони можуть бути застосовані

Отримані результати дозволяють розширити мікроскопічне розуміння динамічних процесів у металічних розплавах, що може бути використане для пояснення поведінки коефіцієнтів переносу (в'язкість, електропровідність, теплопровідність), що є необхідним для застосування металічних розплавів у атомній енергетиці та промисловості. Результати, отримані на основі першопринципного комп'ютерного моделювання вказують на необхідність врахування взаємодії між короткохвильовими поперечними та поздовжніми модами у динаміці металічних розплавів, що буде стимулювати розвиток нових теоретичних підходів. Встановлена лінійна залежність частоти високочастотної моди поперечних колективних збуджень від густини дозволить робити оцінки для термодинамічних точок, недоступних у реальних експериментах.

4.10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація у цілому має логічну структуру, яка визначається метою та етапами вирішення поставлених завдань. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел. Структура дисертації є обґрунтованою. Мова та стиль викладення матеріалу дисертації не викликають суттєвих зауважень.

Дисертаційна робота за структурою, мовою та стилем викладення відповідає вимогам Міністерства освіти і науки України.

У ході обговорення дисертації до здобувача не було висунуто жодних зауважень, щодо суті самої роботи.

4.11 Відповідність дисертації паспорту спеціальності, за якою вона представлена до захисту

Дисертація є самостійною науково-дослідною роботою. Робота виконана на високому науковому рівні, є актуальною і має істотне теоретичне та практичне значення. Автор має ґрунтовну теоретичну підготовку й необхідні професійні знання. Робота відповідає спеціальності 104 «Фізика і астрономія».

5. З урахуванням вище зазначеного, на фаховому семінарі зі спеціальності 104 – «Фізика і астрономія» відділу теорії м'якої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України ухвалили:

- 5.1 Дисертаційна робота Демчука Тараса Васильовича на тему “Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках” є завершеною науковою працею, у якій розв’язано актуальне наукове завдання - опис одночастинкової та колективної динаміки рідких металів при високих тисках на основі першопринципних методів комп’ютерного моделювання у поєднанні з методом узагальнених колективних збуджень, що відповідає спеціальності 104 – «Фізика і астрономія» та має важливе значення для галузі знань 10 – «Природничі науки».
- 5.2 У 13 наукових публікаціях повністю висвітлено матеріали дисертації Демчука Т.В., з них 4 статті, які включено до міжнародних наукометричних баз.
- 5.3 Дисертація Демчука Т.В. відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження вимог до оформлення дисертації», Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії (Постанова Кабінету Міністрів України від 06.03.2019 р., № 167).
- 5.4 З урахуванням наукової зрілості та професійних якостей Демчука Т.В. дисертаційна робота “Особливості одночастинкової та колективної динаміки в металічних розплавах при нормальних та високих тисках” рекомендується для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді.

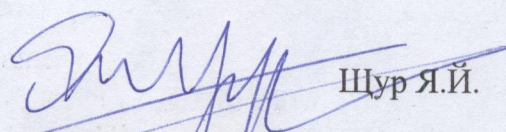
За затвердження висновку проголосували:

за	-	14 (одностайно)
проти	-	Немає
утримались	-	Немає

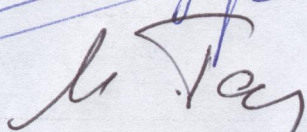
Головуючий на засіданні фахового семінару,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник


Пацаган Т.М.

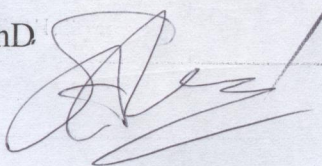
Рецензенти:
доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник


Шур Я.Й.

доктор фізико-математичних наук,
професор


Токарчук М.В.

Відповідальний у ННІ за атестацію PhD,
доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник


Швайка А.М.