

До разової спеціалізованої ради ДФ 35.156.009
Інституту фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України
м. Львів, вул. Свенціцького, 1

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

на дисертаційну роботу **Іленкова Іллі-Миколи Анджейовича**
«Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання»

подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія (10 – Природничі науки)

Актуальність теми дисертаційної роботи. Методи комп'ютерного моделювання зарекомендували себе як надійний та ефективний інструмент дослідження реальних фізичних ефектів. Зокрема, молекулярна динаміка відкриває можливості для аналізу кореляцій, релаксаційних та пропагаторних процесів у неупорядкованих середовищах як на атомарному, так і на колективному рівнях. Особливе значення має *ab initio* молекулярна динаміка, яка враховує квантово-механічну природу модельованих систем та дозволяє простежити процеси розриву та утворення хімічних зв'язків на електронному рівні, що є суттєвою перевагою над іншими методами моделювання. Додаткову надійність отриманих результатів забезпечує використання теорії узагальненої гідродинаміки, зокрема метод узагальнених колективних мод, який дозволяє здійснювати глибокий теоретичний аналіз колективної динаміки рідин. Власне, дисертаційна робота І.-М. Іленкова «Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання» присвячена комплексному вивченню динамічних властивостей рідин із поєднанням *ab initio* молекулярної динаміки та теоретичного аналізу в рамках узагальненої гідродинаміки. Такий підхід забезпечує високий рівень достовірності отриманих результатів, тому **актуальність даної дисертаційної роботи** повністю відповідає сучасним вимогам до наукових досліджень у галузі фізики конденсованого стану.

Мета дослідження – вивчення динамічних характеристик рідин з асоціатами та встановлення впливу короткоживучих зв'язків на дисперсію колективних збуджень.

Зв'язок роботи з науковими програмами, темами та грантами. Дана дисертаційна робота була виконана відповідно до основних напрямків досліджень Інституту фізики конденсованих систем ім. І. Р. Юхновського НАН України. Дисертаційні дослідження проводились в межах проекту Національного фонду досліджень України та гранту НАН України дослідницьким лабораторіям/групам молодих вчених НАН України для проведення досліджень за пріоритетними напрямками розвитку науки і техніки:

1. «Встановлення природи незвичних колективних властивостей неупорядкованих систем: Теорія і комп'ютерне моделювання» (номери держреєстрації: № 0120U104922, № 0121U111728, № 0123U103903);
2. «Особливості динамічної структури неупорядкованих систем: теорія та ab initio моделювання» (номер держреєстрації № 0124U002074)

Структура дисертації. Дисертаційна робота відповідає вимогам до оформлення дисертацій відповідно до наказу Міністерства освіти і науки України № 40 від 12.01.2017 «Про затвердження вимог до оформлення дисертацій».

Дисертаційна робота являє собою обґрунтоване, логічно викладене, завершене наукове дослідження. Вона викладена на 132 сторінках, з основною частиною роботи у 100 сторінок. Робота містить посилання на 141 наукову працю опубліковану в українських та міжнародних видань.

Анотація містить перелік опублікованих наукових праць за темою дисертаційного дослідження та короткий опис актуальності теми та найважливіших отриманих результатів.

Вступ дисертації наводить опис актуальності теми дослідження, окреслює мету та завдання, подає перелік використаних методів дослідження, зазначає особистий внесок здобувача у кожній опублікованій роботі за темою дисертації, характеризує наукову новизну та практичне значення результатів проведених досліджень, подає інформацію про структуру роботи та апробацію матеріалів дисертації.

У *першому розділі* подано літературний огляд методів, що використовували під час проведення досліджень. Серед них можна виокремити основи досліджень колективної динаміки у рідинах, комп'ютерне моделювання методом

першопринципної молекулярної динаміки та теоретичний опис колективної динаміки на основі методу узагальнених колективних мод. В даному розділі також присутній огляд результатів попередніх наукових робіт присвячених дослідженням структурних та динамічних особливостей рідин з асоціатами (розплаву стибію та флюїду водню за високих тисків). Окреслено проблеми та невирішені питання попередніх досліджень, що дає змогу краще розуміти місце та значення досліджень автора дисертаційної роботи у сучасній науці.

У *другому розділі* викладені результати досліджень колективної динаміки металічного розплаву стибію. В ньому детально описана методологія проведення комп'ютерного експерименту на основі першопринципної молекулярної динаміки. Було запропоновано використання п'ятизмінної термо-в'язкопружної динамічної моделі для знаходження пропагаторних та релаксаційних колективних мод. Було показано взаємозв'язок одночастинкових характерних частот коливання атомів зі спостережуваним плато у дисперсії колективних мод на границі псевдо-Брілюєнівської зони. Теоретичний аналіз на основі методу узагальнених колективних мод показав існування двох пропагаторних мод. Для деяких величин хвильового вектору k низькочастотна гілка приймала нульові значення. Автор зазначав, що це може бути наслідком вибору недостатньо великої, за кількістю динамічних змінних, термо-в'язкопружної моделі. Запропоноване трактування плато у дисперсії акустичних збуджень через існування квазі-зв'язаних атомів, знаходження яких здійснювалось шляхом аналізу відстаней між парами атомів.

Третій розділ присвячений дослідженню колективних збуджень молекулярного флюїду водню. Зі спектру автокореляційної функції швидкостей було показано наявність високочастотних коливань, що відповідали нормальним модам молекули водню. Для відтворення цієї високочастотної динаміки в межах підходу узагальнених колективних мод, автор використовував дві допоміжні кореляційні функції: кореляційну функцію першої похідної поздовжнього потоку та функцію відгуку густини. Це дало змогу встановити дві гілки пропагаторних мод у дисперсії колективних збуджень. Окреслено перспективи застосування розробленої методики аналізу колективної динаміки до молекулярних флюїдів за умов високого тиску.

Четвертий розділ зосереджений на дослідженні впливу тиску на колективні збудження у флюїді водню. Еволюція радіальних функцій розподілу зі збільшенням

тиску вказує на поступовий перехід від молекулярного до атомарного флюїду так, що для найбільшої густини водню крива має характерний вигляд як для слабо взаємодіючої рідини. Тоді як результат обчислення високочастотної та макроскопічної швидкості поширення звуку, як функції густини системи, вказує на присутній перехід від переважно молекулярної до атомарної системи. Встановлено, що дослідження колективної динаміки флюїду водню у перехідній області необхідно проводити розглядаючи таку систему у вигляді бінарної з молекулярною та атомарною компонентами. Відповідно, окреслено також перспективу подальших досліджень на основі восьмизмінної моделі узагальнених колективних мод як для бінарних рідин.

У **Висновках** коротко описані найважливіші отримані результати за кожним авторським розділом дисертаційної роботи.

Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій.

Аналіз анотації, тексту дисертації та наукових публікацій І.-М. Іленкова підтверджує наукову обґрунтованість і достовірність результатів. Основні висновки роботи повністю відповідають поставленій меті та завданням дослідження, чітко викладені в загальних висновках та розміщено детальне відображення в публікаціях. Достовірність отриманих результатів забезпечується їхньою апробацією на міжнародних наукових конференціях, публікаціями у провідних фахових виданнях, а також використанням сучасних методів досліджень. Результати дослідження демонструють хорошу відтворюваність та узгоджуються з даними, отриманими іншими науковцями. Це забезпечує високий рівень наукової обґрунтованості результатів, що представлені в роботі.

Наукова новизна. В даній роботі вперше було запропоновано метод для знаходження квазі-зв'язаних атомів на основі часового аналізу відстаней між атомами. Представлено спосіб аналізу їхньої ролі у колективних збудженнях, шляхом аналізу кореляційної функції потоку квазі-зв'язаних атомів. Для вдалого відтворювання високочастотної динаміки у флюїді молекулярного водню вперше було запропоновано в методі узагальнених колективних мод використовувати часові кореляційні функції сприйнятливості густини та першої часової похідної поздовжнього потоку. Для аналізу парціальних внесків до кореляційних функцій густина-густина та потік-потік було запропоновано метод розділення частинок

флюїду на «молекулярні» та «атомарні» використовуючи розподіл за відстанями у вигляді гіперболічного тангенса.

Практичне значення отриманих результатів. Результати представлені у дисертаційній роботі можуть бути застосовані для аналізу даних отриманих з експериментів з непружним розсіюванням нейтронів та X-променів для рідин з асоціатами. Позитивним моментом є чітке вказання наукових груп, для яких отримані результати мають важливе значення. Запропоновані нові підходи знаходження зв'язаних атомів та методи встановлення їхніх внесків до колективних характеристик можуть бути використані під час читання курсів зі статистичної фізики неупорядкованих систем.

Зауваження щодо змісту та оформлення дисертаційної роботи.

1. У першому розділі, під час огляду результатів попередніх наукових досліджень, присвячених вивченню структурних та динамічних особливостей рідин з асоціатами, доцільно було б навести ілюстративні графічні матеріали з літературних джерел, а не обмежуватися лише текстовим описом.
2. У висновках до розділу 2 вказано, що *збільшення* вікна стабільності для QBP навіть на 5 ps веде до суттєвого зростання кількості квазі-зв'язаних пар. Це суперечить твердженням наведеним у пункті 2.3 про те, що збільшуючи відстань відрізання чи *зменшуючи* “час життя” QBP їхня кількість починає швидко зростати.
3. Радіальна функція розподілу для молекулярного флюїду водню за температури 2500 K (рис. 3.1) демонструє виражений пік при $R = 0.75 \text{ \AA}$, що порівнюється з даними про внутрішньомолекулярну відстань атомів водню за кімнатної температури (джерело [130]). Наскільки коректно порівнювати результати при температурі 300 K і 2500 K?
4. У роботі першопринципні моделювання рідин з асоціатами виконано за фіксованих температур. Доцільно було б обговорити, яким чином варіювання температури могло б позначитися на отриманих результатах, зокрема на виявлених структурних та динамічних характеристиках систем.
5. Окремі формулювання та терміни, вжиті в дисертації, виглядають певним жаргоном та англіцизмами, зокрема, це стосується таких виразів як «наближення тісного зв'язку» (переклад з tight-binding approximation), «метод проєктор-доповнених хвиль PAW» (усталеного перекладу немає, але здебільшого вживається формулювання «метод приєднаних проєкційних

хвиль»), «Електронна підсистема поверталась в основний стан в межах теорії функціонала густини», тощо). У тексті дисертаційної роботи одночасно зустрічаються терміни «п'яти змінна» і «п'ятизмінна», «коротко живучі зв'язки» і «короткоживучі зв'язки». Більшість підписів на ілюстративних матеріалах наведені англійською мовою.

Варто зазначити, що представлені зауваження до дисертаційної роботи лише вказують на можливі способи покращення подання її вмісту, та ніяким способом не зменшують її наукову цінність та позитивну оцінку даної роботи.

Загальні висновки.

На мою думку, дисертаційна робота «Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання» є завершеною науковою працею, написаною доступною мовою на високому науковому рівні, і за своєю актуальністю, новизною і науковою цінністю результатів та іншими показниками виконана згідно усіх вимог чинного законодавства України та Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44 (зі змінами, внесеними згідно з постановами Кабінету Міністрів України від 21.03.2022 року № 341, від 19.05.2023 року №502 та від 03.05.2024 № 507).

Автор даної роботи, Ілля-Микола Анджейович Іленков, без сумніву заслуговує на присвоєння ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія у галузі знань 10 – Природничі науки.

Офіційний опонент:

кандидат фізико-математичних наук,
доцент кафедри фізики твердого тіла
Львівського національного університету
імені Івана Франка

Олег БОВГИРА