

ВІДГУК

офіційного опонента, доктора фізико-математичних наук, професора кафедри прикладної математики Інституту прикладної математики та фундаментальних наук Національного університету «Львівська політехніка»

Костробія Петра Петровича

на дисертаційну роботу Іленкова Іллі-Миколи Анджейовича

на тему: **«Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання»**

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

Актуальність теми дисертаційного дослідження.

Дослідження рідин з асоціатами становить значний науковий інтерес у зв'язку з їхньою складною поведінкою на мікроскопічному рівні. Це зумовлює їхні унікальні динамічні та структурні властивості таких систем. Подібні дослідження мають насамперед фундаментальне значення, оскільки дозволяють глибше зрозуміти природу взаємодії електронної та ядерної підсистем за термодинамічних параметрів, які важко відтворити традиційними експериментальними методами. Характерним прикладом є водень у верхніх шарах атмосфери газових гігантів, зокрема Юпітера, де реалізуються умови близькі до таких, що досліджуються у даній дисертаційній роботі.

Водночас вивчення колективної динаміки рідин дозволяє отримати фізично релевантні характеристики, як от швидкість поширення звуку у середовищі, знання яких має безпосереднє прикладне значення для енергетики чи матеріалознавства. У контексті сучасного розвитку фізики конденсованого стану, особливого значення набувають дослідження спрямовані на вивчення колективних збуджень та мікроскопічних механізмів переносу. Саме цим питанням присвячена робота здобувача, де застосовано методи *ab initio* молекулярної динаміки у поєднанні з підходом узагальнених колективних мод.

Використана у даній дисертаційній роботі сучасна методика першопринципного моделювання є ідеальним підходом, що дозволяє відтворювати та аналізувати правильну атомістичну структуру та динамічні характеристики рідин з асоціатами, адже утворення та розрив хімічних зв'язків можна спостерігати на електронному рівні тільки методом *ab initio* молекулярної динаміки. Актуальність таких досліджень є вкрай важливою з огляду на потребу створення цілісної картини поведінки речовини за екстремальних умов, що має значення як для фундаментальної науки, так і для вирішення прикладних завдань.

З огляду на викладене, тема дисертаційної роботи І.-М. А. Іленкова є актуальною, оскільки ґрунтується на застосуванні одного з провідних сучасних методів комп'ютерного експерименту – першопринципної молекулярної динаміки. Дослідження на рівні електронної взаємодії забезпечують можливість одержання достовірної інформації про структурні та динамічні властивості рідин, у тому числі рідин з асоціатами, з дуже високою точністю та відтворенням реальних фізичних ефектів, котрі проявляються у природних умовах.

Обґрунтованість і достовірність наукових результатів.

Обґрунтованість і достовірність результатів, отриманих у дисертаційній роботі, забезпечується коректно сформульованою метою та завданнями дослідження, використанням сучасних теоретичних методів аналізу динаміки, а також апробацією результатів на міжнародних наукових конференціях та публікаціями у рецензованих фахових виданнях.

Серед найбільш вагомих наукових результатів автора дисертації варто виділити:

1. Встановлення ролі квазі-зв'язаних атомів у незвичній формі дисперсії колективних збуджень у розплаві стибію; розроблення методики дослідження існування квазі-зв'язаних атомів та встановлення дисперсії колективних збуджень таких частинок.
2. Запропонований новий метод для правильного відтворення високочастотної динаміки в межах підходу узагальнених колективних мод через врахування кореляційних функцій відгуку густини та перших часових похідних потоку. Даний

метод може застосовуватись не тільки для дослідження динаміки у флюїді водню, але й інших сполук, що демонструють схожу поведінку.

- Знайдену особливість у залежності швидкості звуку від густини системи, що вказує на присутній перехід від панівної молекулярної до атомарної компоненти у системі флюїду водню. Запропонований метод розділення внесків до кореляційних функцій густина-густина від атомарної та молекулярної підсистеми через моделювання функції розподілу за відстанями.

Практична цінність дисертаційної роботи

Основна цінність даної роботи полягає у розширенні наукового розуміння колективної динаміки у рідинах з асоціатами. В дисертаційній роботі запропонований метод розділення внесків від зв'язаної та відокремленої підсистем до кореляційних функцій, котрий може бути також застосований для інших систем зі схожою поведінкою. Результати, представлені у дисертації, можуть бути використані для кращої інтерпретації експериментальних даних непружного розсіювання рентгенівських променів при дослідженні динамічних характеристик рідин з асоціатами.

Повнота викладу у наукових публікаціях, зарахованих за темою дисертації.

Основні результати дисертаційної роботи в достатній мірі висвітлено у 8-ми наукових працях, серед них дві статті у наукових фахових виданнях, котрі входять до наукометричної бази даних Scopus, один препринт та п'ять тез доповідей, три з яких належать всеукраїнським та дві міжнародним конференціям.

Структура, оцінка мови, стилю та оформлення дисертаційної роботи

Дисертаційна робота написана українською мовою з дотриманням норм академічного наукового стилю. Використана в даній роботі термінологія є коректною та відповідає загальноприйнятим науковим стандартам. Стиль викладення матеріалу характеризується послідовністю та логічністю, що забезпечує доступність сприйняття як загальних положень, так і отриманих результатів. Викладені результати досліджень і їх обговорення структуровані та аргументовані, що сприяє розумінню поставлених наукових завдань та способу їхнього вирішення.

Дисертаційна робота складається з анотації, вступу, розділу присвяченому літературному огляду, трьох авторських розділів, висновків, списку використаних джерел та двох додатків. Основна частина дисертації викладена на 100 сторінках, при повному обсязі дисертації у 132 сторінки.

Список використаних джерел охоплює 141 найменування, у тому числі присутні власні публікації здобувача, в яких відображено основні наукові результати дисертаційної роботи, а також провідні наукові праці за темою дисертаційного дослідження. У списку присутні публікації останнього десятиліття видані у фахових міжнародних виданнях, що свідчить про актуальність та сучасний рівень дослідження.

В Анотації подано короткий опис наукової проблематики проведених досліджень, об'єкта та методів досліджень, перелічені основні результати дисертаційної роботи. Подано список опублікованих праць за темою дисертаційної роботи.

У Вступі сформульовано актуальність теми дисертаційного дослідження, окреслені мета та завдання дослідження, коротко описані методи досліджень, представлена наукова новизна та практичне значення отриманих результатів, окреслено особистий внесок автора дисертації у спільних публікаціях та описана структура дисертаційної роботи.

Перший розділ дисертаційної роботи присвячений літературному огляду літературних джерел, що стосуються досліджень розплаву стибію та флюїду водню за високих тисків. У ньому розглянуто як експериментальні роботи, так і дослідження, виконані з використанням методів комп'ютерного моделювання. Огляд супроводжується критичним аналізом, проведеним автором, що дає змогу обґрунтувати вибір напрямку дослідження. Окрім того, у даному розділі подано характеристику сучасних підходів до вивчення колективної динаміки рідин, зокрема теоретичного підходу узагальнених колективних мод та першопринципного моделювання молекулярної динаміки.

У другому розділі представлені результати дослідження колективної динаміки розплаву стибію за температури близької до температури плавлення. Було показана наявність широкого плато у дисперсії колективних збуджень. Теоретичний аналіз методом узагальнених колективних мод показав існування двох поширювальних мод, одна з яких

співпадала з плато у дисперсії колективних збуджень. Було запропоновано пояснення природи цієї пласкої області у дисперсії через наявність у системі квазі-зв'язаних атомів, дисперсія колективних збуджень яких демонструвала пласку поведінку протягом широкого діапазону значень хвильових векторів k .

Третій розділ присвячений дослідженням колективної динаміки молекулярного флюїду за температури 2500 K та густини 284,73 кг/м³ комбінацією методів першопринципної молекулярної динаміки та підходу узагальнених колективних мод. Було показано існування двох гілок у дисперсії колективних збуджень, високочастотна гілка відповідала внутрішньомолекулярним нормальним модам. Для правильного відтворення високочастотної динаміки методом узагальнених колективних мод, було запропоновано використовувати дві додаткові кореляційні функції (кореляційних функцій відгуку густини та першої часової похідної потоку) задля знаходження невідомих статичних кореляторів та кореляційних часів в узагальненій гідродинамічній матриці.

Четвертий розділ містить результати досліджень колективної динаміки флюїду водню при ізотермі 2500 K за ряду густин від 284,73 – 960,976 кг/м³. Були встановлені дисперсійні криві для кожної густини, де для усіх досліджуваних систем не спостерігали характерну для густих рідин позитивну дисперсію звукових коливань. Було встановлено, що залежність макроскопічної адіабатичної та високочастотної швидкості звуку від густини системи має перегин, що вказує на структурний перехід рідини за даних термодинамічних умов. Було показано вдале відтворення часових кореляційних функцій п'ятизмінною динамічною моделлю для повністю дисоційованої системи. Запропоновано використання розширеного набору динамічних змінних, котрий враховуватиме парціальні внески від молекулярної та атомарної компоненти системи до кореляційних функцій густина-густина та потік-потік.

У *Висновках* сформульовані основні найважливіші результати дисертаційної роботи.

Зауваження до дисертаційної роботи.

В цілому дисертаційна робота виконана на високому рівні, проте слід зробити ряд зауважень:

1. У термо-в'язкій моделі узагальненої гідродинаміки коефіцієнти в'язкості, теплопровідності та перехресні коефіцієнти переносу залежать від хвильового вектора. Як це використовується у Ваших розрахунках?
2. З чим на Вашу думку пов'язаний пік автокореляційної функції швидкостей (рис. 3.2) на малих частотах для молекулярного флюїду гідрогену?
3. При дослідженні розподілу атомарної та молекулярної компонент у реакційній моделі флюїду водню очевидно існують дифузійні процеси. Що Ви можете сказати про їх вплив?
4. Не зважаючи на незначну кількість описок в роботі варто було б дотримуватись україномовних позначень осей, зокрема на рис. 3.2, 3.2б, 3.3, 3.5, 3.7, 4.2, 4.4 та 4.9.

Вказані вище зауваження не знижують загальної наукової цінності та актуальності дисертаційної роботи, яку можна вважати завершеним дослідженням.

Загальний висновок про відповідність роботи встановленим вимогам.

Дисертаційна робота І.-М. А. Іленкова є завершеною науковою працею, яка висвітлює результати власних досліджень колективної динаміки рідин з асоціатами, зокрема розплав атомів стибію з наявним квазі-зв'язком та флюїд водню за високих тисків.

Робота виконана на достатньому рівні, основний метод моделювання використаний у даному дослідженні – першопринципна молекулярна динаміка, котру відносять до провідних методів комп'ютерного експерименту. Поданий літературний огляд та характер проведених досліджень свідчать про повноцінне оволодіння автором досліджуваної тематики.

За рівнем актуальності, ступенем наукової новизни та практичною значущістю отриманих результатів дисертаційна робота «Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання» відповідає вимогам Наказу МОН

від 12.01.2017 № 40 “Про затвердження вимог до оформлення дисертацій”, зареєстрованим у Мін’юсті 03.02.2017 № 155/30023 (зі змінами, внесеними згідно з Наказом від 31.05.2019 № 759), а її автор заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія у галузі знань 10 – Природничі науки.

Офіційний опонент

Доктор фізико-математичних наук, професор кафедри прикладної математики

Інституту прикладної математики та фундаментальних наук, Національного Університету
«Львівська Політехніка»

П. П. Костробій