

Рецензія

на дисертацію Дмитра Юрійовича Шаповала
“Кооперативні явища, скейлінг та утворення структур
у моделях реакційно-дифузійних процесів”

Дисертація Дмитра Шаповала “Кооперативні явища, скейлінг та утворення структур у моделях реакційно-дифузійних процесів” присвячена дослідженню низки статистико-механічних аспектів теорії хімічних реакцій. Хімічні реакції можна трактувати як реакційно-дифузійний процес і вивчати часові залежності чи стаціонарні стани реакційно-дифузійних систем методами статистичної механіки. Нерівноважна система класичних частинок, які дифундують у поросторі і пара яких при зустрічі анігілює, є надзвичайно багатим об'єктом дослідження для фізиків, математиків чи хіміків. У дисертації Дмитра Шаповала розглянуто 1) перехід між двома кооперативними режимами — дифузійно обмеженим та реакційно обмеженим — у коагуляційно-дифузійному процесі зі стохастичним скиданням (модель на одновимірному ланцюжку і ґратці Бете, розділ 2), 2) асимптотику густини частинок та кореляції густина-густина у двокомпонентній реакційно-дифузійній системі, де переміщення частинок стається як польоти Леві (представлення теорії поля з наступним ренормгруповим аналізом, розділ 3), 3) рівноважні властивості адсорбатів, виниклих у каталітичних реакціях (формалізм ґраткових газів на одновимірному ланцюжку, ґратках Бете і Фушімі, розділ 4). Відразу ж зазначу, що результати, які представлені у дисертації, опубліковано у 3 статтях у *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* і 1 статті у *Physical Review E* – рішення редакторів і рецензентів цих авторитетних журналів свідчать і про своєчасність досліджень, і про їх новизну, і про їх значимість для спільноти дослідників статистичної фізики. Крім того, результати дисертації представлялися на таких поважних міжнародних конференціях як МЕСО43 (Краків), МЕСО46 (Рига), StatPhys2019 (Львів) (разом більше 10 конференцій).

Переходячи до власних оцінок, почну з характеру розв'язаних задач: це спеціальне, але важливе дослідження у розділі 2, яке пов'язує (з'ясовує як змінюється) скейлінг між двома зраними раніше граничними критичними режимами — дифузійно обмеженим і реакційно обмеженим; це використання представлення керуючого рівняння як багаточастинкового квантового гамільтоніана з наступним реногруповим аналізом відповідної теорії поля — такі обчислення в іншому контексті магнетиків та полімерів вже давно виконуються в Інституті фізики конденсованих систем НАН України (розділ 3); це всесторонній аналіз адсорбатів, виниклих у результаті каталітично-активованих реакцій у розділі 4 (різні моделі каталітичних елементів, різні ґратки). Робота над задачами дисертації збагатила тематику Інституту фізики конденсованих систем НАН України, до якої можна тепер сміливо додати теорію реакційно-дифузійних процесів і хімічних реакцій. Приємне враження справляє різноманіття використаного апарату: диференційні рівняння в частинних похідних, спеціальні функції (розділ 2), техніка перенормувань, аналіз діаграм Файнмана (розділ 3), техніка рекурентних співвідношень для ґраток Бете і Фушімі (розділ 4), чисельні методи, у яких виникає потреба на певному етапі досліджень — все це свідчить про рівень Дмитра Шаповала і його здатність виконувати дослідження з теоретичної фізики. Дисертація добре структурована, складна аргументація викладена просто, але без втрати строгості, деякі технічні обчислення винесено у два додатки. Дисертація містить досить повну оглядову частину (розділ 1), що дає змогу не вузькому спеціалісту зорієнтуватися у ділянці теорії реакційно-дифузійних процесів, а також добре укладений список використаних джерел, що налічує 269 позицій.

Я не маю якихось серйозних зауважень до дисертації Дмитра Шаповала. Однак, при захисті хотів би почути коментарі автора стосовно наступного. За моделі для реакційно-дифузійних процесів часто вибрані ґратки Бете з координаційним числом $q=3$ чи Фушімі з $t=2$ (наприклад, у розділі 4). А чому не

розглядати натомість, здається, реалістичнішу шестикутну гратку чи гратку кагоме? Що втрачаємо, коли переходимо, скажімо, від шестикутної гратки до гратки Бете з $q=3$, у якій немає петель?

Загалом, на мою думку, дисертація додає у розумінні кооперативної поведінки при хімічних реакціях і методів, якими такі системи можна вивчати. Я переконаний, що вона задовольняє всім вимогам до такого типу дисертацій, а її автор — Дмитро Юрійович Шаповал — заслуговує ступеня доктора філософії (104 - фізика та астрономія; 10 - природничі науки).

Завідувач відділу квантової статистики

Інституту фізики конденсованих систем НАН України

доктор фіз.-мат. наук, професор

О.В. Держко