

РЕЦЕНЗІЯ

на дисертаційну роботу Іллі-Миколи Іленкова

на тему:

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

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

У дисертації «Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання» Ілля-Микола Іленков досліджує колективні збудження в рідинах з асоціатами, а саме розплаву стибію та флюїду водню в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду. Робота виконана на основі поєднання узагальненої гідродинаміки та *ab initio* молекулярної динаміки. Структура дисертації включає вступ, огляд літератури, три оригінальні розділи, загальні висновки, два додатки та список використаних джерел, який налічує 141 покликів літератури. Дисертаційна робота містить 25 рисунків з повним обсягом дисертаційної роботи у 132 сторінки.

Вступна частина дисертаційної роботи містить опис актуальності теми, мети та завдання дослідження, практичного значення результатів одержаних в ході виконання досліджень, особистого внеску здобувача та наукової новизни отриманих результатів.

У першому розділі дисертаційної роботи автором ґрунтовно розглядаються загальні підходи до опису колективної динаміки рідин. Значної уваги приділено огляду літератури щодо властивостей розплаву стибію, зокрема – структурним особливостям такого розплаву при переході від кристалічного до рідкого стану, а також флюїду водню, де визначено наявні прогалини та дискусійні аспекти попередніх досліджень. Наведено детальний виклад концепцій *ab initio* молекулярної динаміки, розглянута молекулярна динаміка на поверхні Борна-Опенгеймера, теорія функціоналу густини та рівняння Кона-Шема. Розділ завершується стислим оглядом методу узагальнених колективних мод, що є особливо важливим для аналізу колективних збуджень у рідинах.

Другий розділ роботи зосереджений на дослідженні колективної динаміки розплаву стибію, у якому утворюються короткоживучі асоціати. Моделювання були виконані методом функціоналу густини. Серед отриманих результатів подано структурні характеристики, а саме: радіальна функція розподілу, що демонструє перегин в межах першої координатної сфери, та статичний структурний фактор, який володіє схожою поведінкою в оберненому просторі. В рамках вивчення динамічних властивостей розраховано середньо-квадратичні зміщення, спектри автокореляційних функцій швидкостей, кореляційні функції густина-густина та потік-потік, а також дисперсійні криві отримані як з положень піків у Фур'є-перетворенні кореляційних функцій потік-

потік, так і з власних значень теоретичної моделі узагальнених колективних мод. Автор пояснює наявність протяжного плато у дисперсії колективних збуджень через наявність у системі квазі-зв'язаних атомів та демонструє метод для їхнього виявлення за допомогою часового аналізу відстані між парами атомів. Крім того, ним пропонується новий метод для розрахунку динамічної змінної поздовжнього потоку для квазі-зв'язаних атомів через врахування відносних рухів частинок.

У третьому розділі дисертації, автором представлено результати дослідження системи молекулярного водню, використовуючи підхід, який є комбінацією методу *ab initio* молекулярної динаміки та теоретичного аналізу колективної динаміки методом узагальнених колективних мод. Отримані радіальні функції розподілу демонструють поведінку характерну для молекулярної рідини, де положення першого піку вказує на середню відстань між атомами у молекулі водню. Автокореляційна функція швидкостей та її частотний спектр демонструють характерні для молекулярних флюїдів властивості, а саме: осциляцію та виразний мінімум в автокореляційній функції швидкостей, а також високочастотні та низькочастотні піки у Фур'є-спектрі кореляційної функції. Для знаходження високочастотної гілки в дисперсії колективних збуджень, автор дисертації запропонував використовувати кореляційні функції першої часової похідної потоку та функцію лінійного відгуку густини.

Четвертий розділ дисертації присвячений дослідженню впливу тиску на колективні збудження у водневому флюїді. Статичні структурні фактори та радіальні функції розподілу за своїм виглядом відображають перехід від молекулярного до атомарного стану. Автор встановив, що для правильного теоретичного опису динаміки флюїду водню, у якому співіснують атомарна та молекулярна компоненти, необхідно застосовувати розширену модель, що включатиме парціальні внески від компонент системи до кореляційних функцій густина-густина та потік-потік. Ним було запропоновано метод для розрахунку цих внесків, використовуючи розподіл за відстанями у вигляді гіперболічного тангенса.

Проведені дослідження були опубліковані у двох статтях журналів, що входять до наукометричної бази даних Scopus. Результати по дослідженню стибію опубліковано в Journal of Physics: Condensed Matter (Q2). За матеріалами досліджень молекулярного водню опубліковано статтю в Journal of Physical Studies (Q4). Результати досліджень впливу тиску на колективні збудження флюїду водню опубліковано в препринті на arXiv.org. Також, матеріали дисертації доповідались на трьох всеукраїнських та двох міжнародних конференціях. Усе це є свідченням наукової цінності, обґрунтованості та апробації отриманих результатів серед українських та зарубіжних науковців.

Підсумовуючи, дисертаційна робота І.-М. Іленкова є добре викладеною науковою працею, з належною логікою і структурою, в ній продемонстровано ґрунтовне володіння методами, містить оригінальні та важливі наукові результати. Суттєвих недоліків у цій роботі мною не виявлено, зауважень не маю.

Вважаю, що ця дисертаційна робота відповідає вимогам порядку присудження ступеня доктора філософії згідно нормативно-правових документів Міністерства освіти і науки України та постанов Кабінету Міністрів України, а автор дисертації Ілля-Микола Іленков заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії в галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

22 вересня 2025 р.



Тарас Пацаган

д. фіз.-мат. наук,
завідувач відділу теорії м'якої речовини,
заступник директора з наукової роботи
Інституту фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України