

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертацію
ГОРДІЙЧУКА Володимира Вікторовича
«Базисна система в теорії плинів:

від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням»

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

Дисертаційна робота присвячена розвитку нового підходу до вибору базисної системи у статистичній теорії простих плинів. Йдеться про таку базисну систему, яка могла б замінити чинну класичну, якою на даний час є модель пружних сфер чи м'яких сфер з короткосяжним відштовхуванням. Важливими вимогою до такої нової базисної системи є можливість її теоретичного трактування та аналітичного опису, подібно до того, як це є у випадку пружних сфер. Це останнє, дозволило б використовувати цю базисну систему, наприклад, в методі теорії збурень для побудови мікроскопічної молекулярної теорії простих, неасоціативних плинів у широкому діапазоні термодинамічних параметрів.

Дисертація складається зі вступу, трьох розділів основного тексту, висновків та списку використаних джерел, загальний обсяг становить 107 сторінок. У кінці роботи наведено додатки з окремими деталями обчислень та списком публікацій дисертанта.

У **Вступі** наведено обґрунтування актуальності проблематики дисертаційної роботи та означено мету і завдання роботи, визначено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, охарактеризовано особистий внесок дисертанта та приведено коротку характеристику дисертаційної роботи.

Завданням **першого розділу** дисертаційної роботи є зробити огляд літератури за тематикою базисної системи у статистичній теорії рідин та плинів. Дисертантом проаналізовано хронологію становлення концепції виключеного об'єму та її використання починаючи з роботи Ван-дер-Ваальса та наступного продовження у формалізмі термодинамічної теорії збурень Цванціга. Особливу увагу звернено на використання в теорії збурень базисної системи пружних сфер та на розділення парної міжчастинкової взаємодії на відштовхування та притягання. Показано переваги та недоліки такого підходу до розділення взаємодій. Наведено обмеження, які виникають при використанні базисної системи тільки з відштовхувальними взаємодіями. Зокрема, наголошено на проблемних моментах опису м'якого відштовхування пружними сферами з ефективним діаметром твердої серцевини.

Другий розділ присвячений дослідженню колективної динаміки плин у пружних сфер. Основна увага зосереджена на питанні негідродинамічних колективних збуджень, які виникають в такому плинні. Також проведено порівняння результатів для плин пружних сфер з результатами для плин з м'яким короткосяжним відштовхуванням. Отримано, що відхилення від лінійного гідродинамічного закону дисперсії зі збільшенням хвильового числа є негативним у випадку пружних сфер, тоді як для м'яких сфер та простих плинів, в цілому воно позитивним. Подібна картина є і для залежності від густини відношення питомих теплоємностей – це є зростаючою функцією у випадку пружних сфер, і спадаючою функцією у випадку м'яких сфер та простих плинів, в цілому. У контексті дисертаційного дослідження отримані відмінності між цими двома системами трактуються як ще одне свідчення стосовно обмеженого застосування плин пружних сфер як базисної системи у статистичній теорії плинів та як аргумент для актуальності розроблення нової базисної системи.

Третій розділ як раз і присвячений новій базисній системі, якою пропонується розглядати систему з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням. Запропоновано функціональну форму парного потенціалу такої базисної системи. В основу покладено Ленард-Джонсівське короткосяжне відштовхування, яке доповнено швидко загасаючим короткосяжним притяганням у вигляді суми двох юкавівських експонент. Для знаходження параметрів такого потенціалу використано умови неперервності відштовхувальної та притягальної компонент. Означена таким чином базисна система досліджена з використанням Монте Карло та молекулярно-динамічного комп'ютерного моделювання. На закінчення цього розділу розглядається можливість аналітичного опису нової базисної системи. З цією метою пропонується використати вже існуючі в літературі аналітичні результати для системи пружних сфер з притяганням, яке моделюється функцією Юкави. Для співставлення такої системи у відповідність запропонованій Ленард-Джонс-подібній базисній системі, пропонується скористатися умовою рівності температур Бойля в обох системах. Для ілюстрації такого підходу, проведено порівняння результатів для рівняння стану.

За матеріалами дисертаційного дослідження опубліковано 8 наукових праць, з них: 2 статті у фахових наукових виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science.

Стиль викладу результатів досліджень є науковим, а матеріал дисертації викладено в логічній послідовності. Беззаперечним свідченням якісної наукової обґрунтованості результатів роботи є їхня публікація в провідних журналах наукового напрямку статистичної фізики рідин та плинів, якими є журнали *Journal Chemical Physics* та *Journal of Molecular Liquids*, а також представлення наукового доробку дисертанта на міжнародних та вітчизняних наукових конференціях.

Зауваження до дисертації

- 1) У підрозділі 2.2, при описі методики комп'ютерного експерименту для системи пружних/твердих сфер методом молекулярної динаміки сказано наступне: “Відповідно до алгоритму, температура системи підтримується постійною”. Зважаючи, що властивості цієї системи не залежать від температури, було б корисним детальніше пояснити про що йдеться?
- 2) На основі результатів отриманих у розділі 2 слідує, що використання системи пружних сфер у якості базисної системи для опису та дослідження динамічних властивостей простих плинів є, м'яко кажучи, проблематичним. У той же час, з літературних джерел відомо, що пружні сфери є доброю модельною системою для опису як статичного структурного фактора, так і колективної динаміки рідких металів. Що до останнього, то про це згадується і в тексті розділу 2 (див. на сторінці 50) де йдеться про аналогію між твердосферними плинами та рідкими металами з огляду як на структуру, так і на колективну динаміку з посиланням на статті [79, 80] з переліку джерел цього дисертаційного дослідження. Це потребує відповідного коментаря.
- 3) У дисертаційному дослідженні аргументовано показується, що базисна система пружних сфер є недостатньою для побудови успішного теоретичного опису простих плинів. Зокрема, використання базисної системи пружних сфер не дозволяє отримувати задовільний опис термодинамічних властивостей плинів у першому порядку теорії збурень (у наближенні Ван-дер-Ваальса), потребуючи розрахунку вкладів вищих порядків теорії збурень. Тим не менше, у розділі 3 для теоретичного опису запропонованої базисної системи з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням, дисертантом пропонується використовувати систему з короткосяжним притяганням, але з відштовхуванням на основі тих же пружних сфер?
- 4) Поряд з логічністю викладу матеріалу, в тексті дисертаційної роботи присутня значна кількість граматичних та стилістичних помилок. Також на сторінці 39 вказано, що “Запис траєкторій проводився ... з безрозмірним часовим інтервалом $\Delta t = 0.01$.” Проте мені не вдалося знайти означення цієї безрозмірності.

Проте, наведені зауваження не впливають на загальну позитивну оцінку дисертації, яка засвідчує високий рівень кваліфікації здобувача.

Висновок щодо відповідності дисертації нормам

Вважаю, що за ступенем актуальності проблеми, новизни та практичної значущості отриманих результатів, обґрунтованості висновків, а також особистого внеску здобувача дисертаційна робота «Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням» є завершеним дослідженням. У роботі та наукових публікаціях дисертанта немає порушень академічної доброчесності. Робота відповідає вимогам “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 №44 від 12 січня 2022 року №44 зі змінами, внесеними згідно з Постановою Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року, а також “Вимогам до оформлення дисертації”, затверджених Наказом Міністерства освіти і науки України №40 від 12 січня 2017 року, а її автор — ГОРДІЙЧУК Володимир Вікторович заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 - фізика та астрономія; 10 - природничі науки.

Опонент:

Доктор фізико-математичних наук
професор кафедри фізики металів,
заступник начальника науково-дослідної частини
Львівського національного університету
імені Івана Франка

Юрій ПЛЕВАЧУК