

## Рецензія

на дисертацію **Марії Копчі**

### “Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах”

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

Дисертація Марії Копчі “Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах” присвячена комплексному теоретичному та числовому дослідженню колективних збуджень у бінарних рідинах NaCl, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> та модельній бінарній рідині Коба-Андерсона. Аналітичний розгляд здійснено на базі узагальненої гідродинаміки. Комп’ютерне моделювання проведено у рамках *ab initio* молекулярної динаміки. Таке поєднання теоретичного аналізу та першопринципного числового підходу вважаю, безумовно, сильною рисою даної дисертації, яка дає можливість автору безпосередньо перевіряти на числовому рівні достовірність розвинутих теоретичних результатів. З іншого боку, імплементація отриманих теоретичних напрацювань в *ab initio* розрахунках дозволяє виходити за стандартні можливості готових розрахункових пакетів, що дає змогу отримувати нові, часто, нетипові результати. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (133 найменувань публікацій) та двох додатків. Загальний обсяг дисертації становить 135 сторінок.

У вступі обґрунтовано актуальність теми дослідження, мету, задачі та використані методи дослідження, наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, особистий внесок здобувача.

Перший розділ дисертації містить огляд робіт по дослідженню колективної динаміки у бінарних розплавах. Важливим є розгляд динаміки двокомпонентних рідин за межами гідродинамічної області. Описано алгоритм використаного комп’ютерного моделювання колективної динаміки методом молекулярної динаміки.

Другий розділ присвячений опису розвинутої методики аналізу колективної динаміки йонних розплавів із *ab initio* моделюванням. В розділі запропоновано теоретичну схему аналізу часових кореляційних функцій, отриманих з допомогою методу першопринципної молекулярної динаміки у розплавах солей, що базується на восьми-змінній теорії узагальнених колективних мод для бінарних рідин. Перевагою такого методу є можливість оцінки дисперсії колективних збуджень та  $k$ -залежності негідродинамічних власних мод без стандартної чисельної методики часового перетворення Фур’є. Запропонована в дисертації методика опублікована у журналі *Journal of Molecular Liquids* за співавторством Марії Копчої.

В третьому розділі роботи представлено числові результати першопринципного моделювання колективних збуджень розплавів NaCl та Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Наведено парціальні функції розподілу  $g_{ij}(r)$ , нормовані автокореляційні функції швидкостей, їх Фур’є-спектри, структурні фактори повного заряду та Бхатті-Торнтонна, низка інших фізичних характеристик. Особливий інтерес викликає дисперсія поздовжніх (L) та поперечних (T) колективних збуджень розплаву NaCl, отримана як з положень піків спектральних функцій повного і концентраційного потоків, так і з допомогою теоретичного восьми-змінного методу узагальнених колективних мод. Позитивним є те, що авторка порівнює результати свого теоретичного розгляду із відповідними експериментальними даними для швидкості звуку у розплаві NaCl. Авторка не уникає проблемних, невирішених задач. Зокрема, у висновках до розділу 3 вказує, що залишається незрозумілим походження додаткової пропагаторної власної моди  $z_2(k)$ , яка дозволяє значно скоригувати часові кореляційні функції та частоту довгохвильової LO моди. Спостерігається також ефект наближення частоти  $z_2(k)$  до частоти TO довгохвильової моди в розплавленій йонній рідині, який також поки що не знаходить адекватного пояснення.

У четвертому розділі приведено результати дослідження колективних збуджень у чотирьох бінарних рідинах Коба-Андерсона з однаковою густиною із різним співвідношенням мас компонентів  $R = m_A / m_B \leq 20$ . Спектри поперечних колективних збуджень у двокомпонентних рідинах мають дві гілки: високочастотну – поперечних оптичних мод і низькочастотну – зсувних хвиль. Помічено, що ширина щілини поширення зсувних хвиль зростає із збільшенням співвідношення мас  $R$ . Результати, представлені у четвертому розділі ставлять фундаментальне питання про справедливість «фононної теорії термодинаміки рідин», оскільки всі чотири бінарні системи, розглянуті у розділі, мали теплоємність  $C_V = 2,70 \pm 0,02$  кВ, що значно перевищує значення 2 кВ, граничне для «фононної теорії термодинаміки рідин». Мені дуже імпонує відвертий опис дискусійних, на даний час не повністю зрозумілих, фізичних проблем, з якими зіткнулась авторка дисертації. З одного боку це вказує на наукову добросовісність М. Копчої, з іншого – на те, що тема даного дослідження є актуальною і, значною мірою, недослідженою.

Вважаю, що представлені у дисертаційній роботі результати є важливими з точки зору подальшого розвитку теорії динаміки бінарних рідин, актуальними і цікавими. Поєднання аналітичних підходів до розв'язання проблем гідродинаміки із складними першопринципними методами молекулярної динаміки надає особливої ваги отриманим результатам, оскільки отримані теоретичні результати дістали безпосередню кількісну апробацію та наочне представлення. Там, де це можливо, вони порівнюються з експериментальними даними.

Роботу відзначає добра структурованість, лаконічність, прозорий і зрозумілий виклад матеріалу, в чому відчувається характерний стиль дослідження наукового керівника дисертаційної роботи проф. Т. Брика. Робота опублікована у журналах із високим імпакт-фактором *Journal of Molecular Liquids* та *Physical Review B*, що є свідченням проходження строгої незалежної міжнародної наукової експертизи, а, отже, й ознакою достовірності наукових результатів. Результати також розміщені на порталі arXiv. Результати дисертації представлялись на трьох Всеукраїнських конференціях а також на семінарах ІФКС НАН України, що також є свідченням їх доброї апробації

Вважаю, що дисертаційна робота М. Копчої повністю відповідає вимогам порядку присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №44 від 12 січня 2022 року із внесеними змінами згідно постанови Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року, а її автор — Марія Копча заслуговує ступеня доктора філософії (104 - фізика та астрономія; 10 - природничі науки).

Провідний науковий співробітник  
ІФКС НАН України, д.ф.-м.н.,  
с.н.с.

Ярослав Щур

Підпис провідного наукового співробітника Інституту фізики конденсованих систем  
НАН України Ярослава Щура засвідчую:

Вчений секретар  
ІФКС НАН України,  
канд. фіз.-мат. наук  
Львів, січня 2024 р.

Ірина Бзовська