

До разової спеціалізованої ради ДФ 35.156.007
Інституту фізики конденсованих систем
НАН України
м. Львів, вул. Свенціцького, 1

ВІДГУК

офіційного опонента, доктора фізико-математичних наук, доцента,
професора кафедри фізики металів
Львівського національного університету імені Івана Франка

Штаблявого Ігоря Івановича

на дисертаційну роботу Копчі Марії Іванівни
«Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах»,
представлену на здобуття ступеня доктора філософії
з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Актуальність теми дисертаційного дослідження

Динамічні явища в рідинах на атомному рівні відіграють важливу роль у формуванні багатьох їхніх властивостей. Проте, внаслідок того що ця тематика знаходиться на перехресті фізики конденсованих систем, статистичної фізики та гідродинаміки, однозначне вирішення завдань, що пов'язані з цією областю науки є далеким до завершення. Незважаючи на значний прогрес розвитку експериментальних досліджень у галузі динамічних властивостей рідин, теоретичне пояснення особливостей колективної динаміки є недосконалим. Зокрема, значною мірою це стосується дво- та багатокомпонентних рідин.

Зважаючи на описані проблеми необхідно шукати нові методи для вивчення колективної динаміки частинок. Одним з таких методів є метод молекулярної динаміки, і зокрема першопринципний метод в комбінації з класичними аналітичними методами. Зокрема, на основі згаданої комбінації методів можна розвинути нову методіку дослідження динамічних процесів у рідинах. Теоретичний опис в цьому випадку ґрунтується на використанні методу узагальнених колективних мод який було використано в даній роботі для отримання рівнянь які дозволяють здійснити розрахунок спектрів колективних збуджень і часових кореляційних функцій.

Взявши до уваги зазначене вище, можна стверджувати, що дослідження проведені в цій роботі які були виконані методом молекулярної динаміки з перших принципів та класичних аналітичних методів є актуальними, оскільки дають змогу отримати детальну інформацію про особливості колективної динаміки в деяких двокомпонентних рідинах.

Мета дослідження – вивчення природи колективних збуджень у двокомпонентних рідинах за допомогою аналітичних підходів та першопринципного моделювання методом молекулярної динаміки.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами

Дисертаційну роботу виконано згідно з основними напрямками досліджень Інституту фізики конденсованих систем НАН України відповідно до держбюджетних тем та проєктів:

1. “Процеси впорядкування і властивості багаточастинкових статистичних систем: Теорія і комп'ютерне моделювання” (номер держреєстрації 0119U100663, 2019–2023 рр.),

2. “Встановлення природи незвичних колективних властивостей неупорядкованих систем: Теорія та першопринципне моделювання” (номери держреєстрації 0120U104922, 0121U111728, 0123U103903, 2020–2021, 2023 рр.),

3. «Нові застосування машинного навчання в прогнозуванні незвичних властивостей матеріалів» (номери держреєстрації 0121U114013, 0122U002442, 2021–2022 рр.).

Наукова новизна одержаних результатів

У рамках дисертаційної роботи вперше:

- використано комбінацію методів аналітичної теорії та комп'ютерного моделювання методом молекулярної динаміки що дозволило кількісно вивчити динамічні властивості двокомпонентних рідин.

- виявлено існування третьої гілки негідродинамічних пропаторних мод в досліджених рідинах.

- досліджено аналітично та за допомогою комп'ютерного моделювання зростання та зникнення пропаторної щілини з ростом співвідношення мас компонентів на прикладі модельної бінарної рідини Коба-Андерсена.

Наукове та практичне значення

Результати роботи які пов'язані з використанням комбінації аналітичних методів та комп'ютерного моделювання дають змогу глибше зрозуміти колективну динаміку в неупорядкованих системах. В результаті вивчення динамічних властивостей рідин крім акустичних збуджень і інших негідродинамічних процесів виявлено області частот де такі процеси можна досліджувати експериментальними методами.

Нові підходи для вивчення колективних явищ можуть бути використані під час читання курсів які стосуються статистичної фізики неупорядкованих систем.

Повнота викладення матеріалу дисертації у наукових публікаціях

Результати досліджень опубліковано у наукових статтях високоцитованих журналів, а також представлені та апробовані на вітчизняних конференціях та семінарах. За результатами досліджень опубліковано дві статті в журналах що індексуються в міжнародних наукометричних базах даних Web of Science та Scopus та належить до першого квартилю (Q1) За матеріалами дисертації опубліковано також один препринт. Опубліковано також три тези доповідей на конференціях. На основі аналізу обсягу та змісту публікацій Марії Копчі можна стверджувати, що вони цілковито відображають результати дисертаційної роботи. В них детально описані усі результати проведених досліджень, які свідчать про розкриття теми дисертації, досягнення її мети й обґрунтування наукової новизни.

Відсутність порушень академічної доброчесності

Порушень академічної доброчесності в дисертаційній роботі Копчі М. І. "Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах" та в її наукових публікаціях за темою дисертації не виявлено.

Структура та зміст дисертації, її завершеність та відповідність встановленим вимогам

Представлена дисертаційна робота відповідає вимогам до оформлення дисертацій відповідно до наказу Міністерства освіти і науки України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації».

Дисертація Марії Копчі являє собою обґрунтоване, логічно побудоване, завершене наукове дослідження. Вона складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків, переліку використаних джерел (133 найменування) та додатків. Дисертація викладена на 135 сторінках та містить 39 рисунків, 3 таблиці та два додатки.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми роботи, сформульовано мету, завдання, об'єкт і предмет дослідження, вказано використані методи досліджень, а також окреслено наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, виділено особистий внесок здобувача та відомості про публікації та апробацію результатів роботи.

В першому розділі проведено огляд літератури яка стосується дослідження колективної динаміки в однокомпонентних та двокомпонентних розплавах. В

цьому розділі описано методи теоретичних та експериментальних досліджень колективної динаміки рідин, а також показано зв'язок між ними. Аналізуючи результати досліджень з допомогою цих методів вивчено можливість використання методу молекулярної динаміки як інструменту, який допоможе кількісно дослідити динамічні властивості рідин, які важко вивчати класичними методами.

Другий розділ дисертаційної роботи присвячений опису особливостей використання методу молекулярної динаміки з перших принципів для дослідження колективної динаміки в неупорядкованих системах та застосування методу узагальнених колективних мод для аналізу колективних збуджень в розплавах використовуючи статичні корелятори та кореляційні функції отримані з моделювання. В цьому розділі детально описано методіку аналізу колективних мод з першопринципного моделювання

Третій розділ роботи стосується дослідження колективної динаміки в розплавах NaCl та Al₂O₃ що здійснено шляхом спільної інтерпретації результатів моделювання методом молекулярної динаміки та теоретичних методів аналізу. Встановлено, що для цих розплавів існує довгохвильова щілина між частотами повздовжніх та поперечних оптичних збуджень. В цьому розділі для іонних розплавів NaCl та Al₂O₃ встановлено існування внесків від поперечних оптичних колективних збуджень до повздовжньої колективної динаміки.

У четвертому розділі представлено результати дослідження поперечних колективних збуджень в бінарній рідині Коба-Андерсена для різних масових співвідношень компонентів за фіксованої числової густини, наведено та проаналізовано рівняння для щілини поширення зсувних хвиль у бінарних рідинах в результаті чого встановлено зростання частоти оптичних мод та зростання щілини для низькочастотних зсувних хвиль у випадку зростання масових співвідношень компонентів. В цьому розділі також запропоновано чотиризмінну модель для поперечної динаміки бінарних рідин. У цій моделі враховано крос-кореляції для флуктуацій повного та мас-концентраційного поперечних потоків.

Основна частина дисертаційної роботи завершується **висновками**, які повністю охоплюють та узагальнюють результати отримані в роботі. Достовірність результатів забезпечена використанням добре апробованих методів моделювання та обробки результатів моделювання.

Далі наводиться **список використаної літератури**, а також два **додатки** в першому з яких наведено список публікацій здобувачки за темою дисертації, а в другому – інформацію про апробацію результатів досліджень.

Ступінь обґрунтованості та достовірності наукових положень, висновків, сформульованих у дисертації

Дисертаційна робота Марії Копчі «Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах» виконана на високому науковому та методичному рівні і є завершеним дослідженням в межах поставлених завдань. Для моделювання та теоретичних розрахунків використано добре апробовані методи досліджень. Рукопис дисертації написаний українською літературною мовою з використанням адекватної фахової термінології.

Дискусійні положення й зауваження щодо змісту та оформлення дисертації.

1. В роботі досліджено колективну динаміку в іонних розплавах NaCl та Al₂O₃. Відомо, що після плавлення у цих рідинах не відбувається повної дисоціації, а можливе існування іонних комплексів. Наскільки я розумію, вказана особливість не була врахована в даній роботі. Крім того, можливо це можна було б врахувати провівши дослідження динамічних властивостей за різних температур.

2. В результаті моделювання іонних розплавів в роботі наведено функції розподілу атомів, які дають інформацію про їхню структуру. На мою думку, наведення в роботі атомних комірок отриманих в результаті моделювання дало б додаткову інформацію про структуру розплавів.

3. Для комп'ютерного моделювання іонних рідин в роботі використано метод молекулярної динаміки з перших принципів. Недоліком цього методу на даний час є можливість моделювання систем з невеликою кількістю частинок. Можливо в роботі варто було використати класичний метод молекулярної динаміки з використанням одного з добре апробованих напівемпіричних потенціалів, що дало б змогу моделювати більші системи і таким чином покращити точність результатів?

4. В роботі наявна невелика кількість помилок та неточностей (наприклад словосполучення «сили частинок» на ст. 46) та відсутнє пояснення деяких умовних скорочень (зокрема PAW потенціал). Також було б доцільним робити позначення та підписи на рисунках українською мовою.

Незважаючи на це, висловлені зауваження не впливають на загальне позитивне враження про дисертаційну роботу та не зменшують її наукової цінності.

Загальний висновок про відповідність роботи встановленим вимогам.

Вважаю, що дисертація Копчі Марії Іванівни «Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах» є цілісною і завершеною науковою працею,

виконаною на високому науковому рівні, отримані результати є достовірними, а висновки обґрунтованими

Дисертаційна робота "Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах" відповідає вимогам Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у вищих навчальних закладах (наукових установах), затвердженого постановою Кабінету Міністрів України № 261 від 23.03.2016 р. (зі змінами та доповненнями від 03.04.2019 р. № 283), а також вимогам, передбаченим Порядком присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженим Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44, а її авторка – Копча Марія Іванівна – заслуговує присудження їй ступеня доктора філософії у галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, доцент,
професор кафедри фізики металів
Львівського національного університету
імені Івана Франка

Ігор ШТАБЛАВИЙ