

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА
на дисертаційну роботу **Копчі Марії Іванівни**
"Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах",
яку подано на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія (10 -- Природничі науки).

Актуальність теми дисертаційної роботи

Комп'ютерне моделювання конденсованих систем на атомарному рівні робить вражаючі успіхи як у можливості вивчати кореляції в русі окремих атомів, так і в розумінні колективних релаксаційних і пропагаторних процесів у неупорядкованому середовищі. Однак, комп'ютерне моделювання завжди повинно доповнюватись теоретичним аналізом траєкторій та швидкостей частинок, щоб можна було порівняти передбачення теорії з результатами "комп'ютерного експерименту". Власне, дисертаційна робота М. Копчі "Особливості колективних збуджень у бінарних рідинах" присвячена розробці теоретичного аналізу колективної динаміки у двокомпонентних рідинах, який дозволяє ідентифікувати негідродинамічні колективні збудження: оптичні моди в іонних розплавах та зсувні хвилі в поперечній динаміці – та встановити їх особливості. З огляду на дані обставини актуальність досліджень дисертантки не викликає жодних сумнівів.

Структура дисертації

Дисертаційна робота складається з анотації, вступу, переліку умовних скорочень, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел зі 133 найменувань, та двох додатків, що містять список публікацій автора за темою дисертації й відомості про апробацію результатів. Загальний обсяг рукопису складає 134 сторінки.

У *першому розділі* дисертації представлено огляд наукової літератури, де зібрані дослідження по теорії колективної динаміки рідин, комп'ютерному моделюванню та експериментах з непружного розсіювання рентгенівських променів в бінарних розплавах. Важливо, що обговорюється теорія негідродинамічних колективних мод та можливості їх спостережень в комп'ютерному моделюванні динаміки та в реальних експериментах по непружному розсіюванню.

У *другому розділі* дисертації запропоновано **нову методику** аналізу парціальних часових кореляційних функцій, отриманих в першопринципному (ab initio) комп'ютерному моделюванні з метою встановлення спектру колективних мод бінарних розплавів. Варто зазначити, що традиційно для встановлення дисперсії колективних збуджень з комп'ютерного

моделювання аналізувались спектральні функції повздовжнього (L) та поперечного (T) потоків на наявність максимумів, які отримувались з відповідних обчислених часових кореляційних функцій потік-потік шляхом числового Фур'є-перетворення. Як правило, отримані таким числовим чином спектральні функції потоків містять сильні шуми, що ускладнює прецизійне встановлення дисперсії колективних збуджень. У новій методиці, яка запропонована в дисертації, пропонується аналізувати не частотну залежність спектральних функцій, а часову залежність парціальних кореляцій потік-потік і густина-густина на основі 8-змінної динамічної моделі узагальненої гідродинаміки. Такий узагальнений гідродинамічний підхід у рамках теорії узагальнених колективних мод розробляється з кінця 1990-х років у Інституті фізики конденсованих систем НАН України й привів до ряду нових результатів в теорії колективної динаміки рідин, які добре сприйняті міжнародною науковою спільнотою. Розширення методики на використання з першопринципним комп'ютерним моделюванням полягає у використанні певних статичних кореляційних функцій, які вимагають розрахунку флуктуацій густини енергії, в якості параметрів теорії, які визначаються з припасування шести теоретичних парціальних часових кореляційних функцій потік-потік і густина-густина під такі ж, здобуті в *ab initio* комп'ютерному моделюванні. Тут важливо зазначити, що прямий розрахунок флуктуацій густини енергії в *ab initio* комп'ютерному моделюванні є практично нездійснений через надзвичайну трудомісткість і затрати комп'ютерного часу. Тому запропонована методика дозволяє відносно простий аналіз часових кореляційних функцій, отриманих в *ab initio* комп'ютерному моделюванні за допомогою підходу узагальнених колективних мод. Додатковою перевагою запропонованої методики є виконання п'яти точних правил сум для кожної теоретичної парціальної часової кореляційної функції, що забезпечує добре відтворення обчислених з *ab initio* комп'ютерного моделювання часових кореляцій густина-густина і потік-потік. Застосування **нової методики** аналізу продемонстровано в третьому розділі на аналізі колективної динаміки в іонних розплавах NaCl і Al₂O₃.

Результати першопринципного моделювання для іонних розплавів NaCl і Al₂O₃ представлено в *третьому розділі*, зокрема проаналізовано структурні характеристики (парціальні парні функції розподілу частинок, структурні фактори Бхатія-Торнтон) та одночастинкову динаміку (автокореляційні функції швидкостей та їх частотний спектр). Однак, основну увагу в цьому розділі приділено теоретичному аналізу парціальних часових кореляційних функцій потік-потік та густина-густина в іонних розплавах та встановленню спектра колективних мод. Показано, що восьми-змінна динамічна модель здатна дуже добре відтворити парціальні часові кореляційні функції. Для випадку розплаву Al₂O₃ порівнюються

результати теоретичного відтворення парціальних часових кореляційних функцій на основі 8-змінної динамічної моделі з кількома параметрами та 6-змінної моделі без вільних параметрів, що вказує на добре відтворення часових кореляцій запропонованою в розділі 2 методикою. Особливістю колективних збуджень в іонних розплавах є добре означені повздовжні та поперечні не-гідродинамічні збудження оптичного типу, причому як і в іонних кристалах, в розплавах спостерігається щілина по частоті між повздовжніми оптичними (LO) та поперечними оптичними (TO) довгохвильовими збудженнями. Надзвичайно цікавим є **абсолютно новий** результат про можливе зачеплення повздовжньої і поперечної динаміки в іонних розплавах, який слідує зі спектрів колективних мод у довгохвильовій області, однак, необхідно зрозуміти механізм такого зачеплення, чого поки не було запропоновано.

У *четвертому розділі* досліджується поперечна динаміка модельної бінарної рідини Коба-Андерсена при фіксованій густині, але з різним співвідношенням мас компонент R. Показано, що при зростанні співвідношення R відбуваються зміни в дисперсії як високочастотної гілки, так і гілки низькочастотних зсувних хвиль. При цьому, зростає пропаторна щілина в довгохвильовій області для зсувних хвиль, що не вдається описати простою формулою для щілини, яка була отримана для однокомпонентних рідин. Тому, в дисертації зроблено спробу розв'язати аналітично 4-змінну динамічну модель поперечної динаміки з врахуванням крос-кореляцій між флуктуаціями повного (t) та мас-концентраційного (x) потоків. Отримано рівняння для щілини зсувних хвиль в бінарних рідинах, яке при відсутності t-x крос-кореляцій відтворює вираз для щілини зсувних хвиль простих рідин. Для поперечної динаміки бінарних рідин це є **зовсім нові результати**, які заслуговують уваги наукової спільноти.

Висновки дисертаційної роботи чітко сформульовані і містять не лише фіксацію новизни результатів, але й потенційний розвиток теорії в сторону пояснення знайденого зачеплення між повздовжньою і поперечною динамікою в іонних розплавах через не-локальну взаємодію мод, що наведе міст між локальною теорією узагальнених колективних мод (generalized collective modes) та не-локальною теорією взаємодіючих мод (mode coupling theory). Важливо, що два з трьох розділів дисертації пройшли серйозну міжнародну експертизу на етапі рецензування двох журнальних публікації. Наукові статті у добре знаних міжнародних фахових журналах Journal of Molecular Liquids (Scopus Q1, WoS Q1) та Physical Review B (Scopus Q1, WoS Q2) говорять про високий рівень опублікованих досліджень. Матеріал останнього розділу, опублікований як електронний препринт на сервері arXiv.org, містить цікаві результати по залежності поперечної динаміки бінарних рідин від співвідношення мас компонент та новий теоретичний розгляд поперечної динаміки на основі

4-змінної динамічної моделі, в рамках якої отримано нове рівняння для щільності зсувних хвиль в бінарних рідинах. Очевидно, що на основі такого препринту буде опублікована добра наукова стаття.

Практичне значення отриманих результатів

Результати дисертації можуть бути використані при аналізі експериментів по непружному розсіюванні нейтронів і рентгенівських променів на бінарних рідинах. Запропонована методика аналізу динамічних структурних факторів та часових кореляцій густина-густина дозволяє оцінити області хвильових чисел та частот, в яких повинні проявлятися на експериментах не-гідродинамічні оптичні моди. Пошук сигналів від збуджень оптичного типу в бінарних рідинах (і взагалі - від не-гідродинамічних релаксаційних і пропаторних мод) є популярним напрямком експериментальних досліджень, але традиційно для аналізу внесків експериментатори використовують просту підгонку з наближенням кількох гармонічних осциляторів зі згасанням. Нова методика дозволяє правильно оцінити внески та їх кількість від гідродинамічних та не-гідродинамічних мод у експериментальні інтенсивності розсіювання.

Зауваження до дисертаційної роботи

- Для бінарних рідин повздовжня колективна динаміка в дисертації аналізується на основі двох динамічних моделей: 6-змінної (не зовсім добре відтворення часових кореляцій) та 8-змінної (дуже добре відтворення). Виникає природне питання: що буде, коли ще збільшити число динамічних змінних, враховуючи другі часові похідні від потоків і енергії? Чи спостерігається збіжність власних динамічних мод?
- У бінарних рідинах колективні моди суттєво залежать від концентрації компонент. Чи можна передбачити поведінку дисперсії зсувних хвиль від співвідношення мас компонент для інших концентрацій, ніж у моделі Коба-Андерсена (80-20)?

Загальні висновки.

Утім зазначу, що наведені зауваження вказують лише на бажання опонента бачити дисертацію більш досконалою зі своєї точки зору, але не є принциповими з точки зору їх впливу на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи, в якій викладено здобуті дисертантом результати, що є новими й без сумніву мають високу наукову цінність та є помітним для наукової спільноти внеском до опису явищ та процесів у бінарних рідинах. На мою думку, дисертаційна робота "Динамічні процеси у багаторівневих

мезоскопічних системах" є завершеною науковою працею, написаною зрозумілою мовою на високому науковому рівні, й відповідає всім вимогам нормативних документів Міністерства освіти і науки України та Кабінету Міністрів України щодо дисертацій, поданих на здобуття ступеня доктора філософії, а її авторка Копча Марія Іванівна без усякого сумніву заслуговує на присудження ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – фізика та астрономія.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,
академік НАН України,
начальник відділу статистичної фізики та квантової
теорії поля Інституту теоретичної фізики
імені О.І. Ахієзера, ННЦ ХФТІ НАНУ



Ю.В. Слюсаренко

Підпис академіка Слюсаренка Юрія Вікторовича ЗАСВІДЧУЮ:

ТВО директора Інституту теоретичної фізики
ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАН України
кандидат фізико-математичних наук

Л.М. Давидов