

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 розробці нової версії базисної системи у статистичній теорії рідкого стану речовини – системи, яка могла б замінити чинну модель твердих або м'яких сфер з короткосяжним відштовхуванням. Важливою вимогою до такої нової базисної системи є принципова можливість її теоретичного трактування та аналітичного опису для подальшого використання в методі збурень з метою побудови мікроскопічної молекулярної теорії простих, неасоціативних плинів у широкому діапазоні термодинамічних параметрів.

Дисертація складається зі вступу, трьох розділів основного тексту, висновків, списку використаних джерел, додатків з окремими деталями обчислень та списку публікацій дисертанта. Загальний обсяг становить 107 сторінок.

У **Вступі** обґрунтовано актуальність досліджуваних задач дисертаційної роботи, сформульовано її мету і завдання, описано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, наведено стисло характеристику дисертаційної роботи та особистий внесок здобувача.

У **першому розділі** проведено огляд літератури за тематикою досліджень щодо становлення та використання концепції базисної системи у статистичній теорії плинів, починаючи з роботи Ван-дер-Ваальса та термодинамічної теорії збурень Цванціга. Особливу увагу звернено на використання в теорії збурень базисної системи твердих сфер та на розділення повної парної міжчастинкової взаємодії на дві частини, одна з яких відповідає за відштовхування, а інша за притягання. Показано переваги та недоліки чинного підходу до розділення взаємодій. Наведено обмеження, що виникають при використанні базисної системи тільки з відштовхувальними взаємодіями.

У **другому розділі** наведено результати дослідження окремих аспектів колективної динаміки плинину твердих сфер і зокрема, негідродинамічних колективних збуджень, що виникають в такому плинні. Актуальність таких досліджень обумовлена тим, що на противагу добре дослідженим термодинамічним властивостям плинину твердих сфер в якості часто використовуваної базисної системи при описі реалістичних плинів, колективна динаміка цієї моделі поки що залишається недостатньо дослідженою. Проведені порівняння отриманих результатів для плинину твердих сфер з такими ж для плинину

з м'яким короткосяжним відштовхуванням в окремих випадках демонструють принципову відмінність між цими моделями. Зокрема, це стосується залежності показника адіабати (відношення питомих теплоємностей) від густини (зростаюча функція у випадку твердих сфер, і спадаюча функція у випадку м'яких сфер та простих плинів в цілому) та на негативного (тверді сфери) та позитивного (у випадку м'яких сфер та простих плинів в цілому) відхилення від лінійного гідродинамічного закону дисперсії зі збільшенням хвильового числа. Проведенні в роботі порівняння колективної динаміки моделей твердих та м'яких сфер безумовно є оригінальними і важливими. Зокрема, спостережувані відмінності свідчать про обмеженість застосовності моделі твердих сфер у якості базисної системи в статистичній теорії плинів і обґрунтовують актуальність пошуків нової базисної системи, яка б не мала таких відмінностей від реальних плинів.

Третій розділ присвячений базисній системі з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням. На початку запропоновано функціональну форму парного потенціалу базисної системи з короткосяжним притяганням. В основі такої базисної системи є WCA-подібне Ленард-Джонсівське короткосяжне відштовхування, яке на умовах неперервності доповнено швидко загасаючим короткосяжним притяганням у вигляді суми двох юкавівських експонент. У якості критерію короткосяжності використано радіус першої координаційної сфери, значення якого отримано за допомогою аналізу екстремумів радіальної функції розподілу в рідкій фазі плинину Ленард-Джонса. Зазначена базисна система була досліджена в роботі методами комп'ютерного експерименту, зокрема, на предмет існування фазового переходу газ-рідина. Показано, що значення критичної температури знаходиться нижче від потрібної точки плинину Ленард-Джонса, що є важливою необхідною передумовою до базисної системи класу простих плинів в цілому. Також досліджено окремі структурні та термодинамічні властивості базисної моделі і проведено їх порівняння з такими ж для класичного плинину Ленард-Джонса. Зокрема, показано, що радіальна функція розподілу запропонованої базисної системи достатньо добре відтворює першу координаційну сферу плинину Ленард-Джонса в широкому діапазоні термодинамічних станів, включно з діапазоном малих густин та низьких температур. Розраховано три перших віріальних коефіцієнти базисної системи з короткосяжним притяганням і показано їх якісну подібність до відповідних віріальних коефіцієнтів вихідного плинину Ленард-Джонса.

З метою подальшого теоретичного трактування та аналітичного опису термодинамічної поведінки запропонованої базисної системи пропонується використати вже відомі результати для моделі твердих сфер з притяганням, яке моделюється потенціалом Юкави. Як перший крок для співставлення системи твердих сфер з притяганням Юкави у відповідність до запропонованої базисної системи, автор скористався умовою рівності температур Бойля в обох системах. Як ілюстрація доцільності застосування такого підходу, проведено порівняння

поведінки відповідних рівнянь стану зазначених систем (для запропонованої базисної системи з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням рівняння стану досліджувалось методом комп'ютерного експерименту, а для відповідної їй системи твердих сфер з притяганням Юкави було отримано аналітично в рамках одного з підходів середньо-сферичної теорії).

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

Зауваження до дисертації

1. На мою думку, в подальших дослідженнях здобувачу треба відповідальніше і з більшою точністю ставитись до чинної наукової термінології. Зокрема, в тексті (і, навіть, в назві самої роботи) автор часто називає тверді сфери пружними та протиставляє їх до м'яких сфер. Насправді існує принципова різниця між загальнішим поняттям пружного тіла та більш вузьким поняттям абсолютно твердого тіла. З позицій існуючої фізичної термінології м'які сфери також є абсолютно пружними (як і будь-які інші частинки, що взаємодіють між собою з певною заданою потенціальною енергією). Так саме, з точки зору точної термінології, зауваження може викликати як використання самого поняття координаційної сфери у плинах, так і визначення її радіусу за допомогою мінімумів радіальної функції розподілу.

2. В тексті роботи присутня дуже велика кількість різного роду орфографічних, граматичних та стилістичних помилок. Подекуди притягальна частина потенціалу взаємодії називається «привабливою». Прізвища деяких авторів в певних місцях наводяться українською, а в інших – англійською. Деякі підписи до ілюстративних матеріалів наведені англійською (див. Таблицю 3.1).

3. Щодо співставлення запропонованої базисної моделі до моделі твердих сфер з юкавівським притяганням можна зазначити наступне. Вибір досить високої та суттєво надкритичної температури Бойля у якості критерію відповідності цих моделей можна зрозуміти з точки зору подібності поведінки їх другого віріального коефіцієнта, але той самий вибір сильно обмежує можливості порівняння поведінки зазначених двох моделей за більш низьких температур. Зокрема, автору довелось порівнювати рівняння стану цих систем у надкритичній області (див. Рис. 3.10) в той час, як найбільший інтерес викликають саме субкритичні температури (за яких і відбувається фазовий перехід). У подальшому, я рекомендував би автору використати інші умови подібності моделей з метою дослідження їх субкритичної поведінки.

4. Також, у якості рекомендації для подальших досліджень моделі юкавівських плинів я звернув би увагу здобувача на останні роботи Кулінського Володимира Леонідовича з Одеського національного університету імені

І. І. Мечникова стосовно так званого «глобального ізоморфізму» зазначених моделей речовини. На мою думку, цей підхід може виявитись досить корисним при аналітичному визначенні особливих точок на фазовій діаграмі цих плинів за різних значень параметрів потенціалу Юкави.

В цілому, зроблені зауваження та побажання жодним чином не знижують мою загальну оцінку дисертаційної роботи, яка є безумовно позитивною.

Висновок щодо відповідності дисертації нормам

Враховуючи все вище сказане, а також беручи до уваги актуальність, новизну та практичну значимість отриманих автором наукових результатів, його особистий внесок в ці результати, обґрунтованість зроблених ним висновків вважаю, що дисертаційна робота «Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням» 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 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 на присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – фізика та астрономія в галузі знань 10 – природничі науки.

Опонент:

зав. кафедри фізики та математики

Національного університету кораблебудування

ім. адмірала Макарова,

доктор фізико-математичних наук,

професор,

Ушкац М. В.