Рішення
спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Спеціалізована вчена рада ДФ 35.156.006 Інституту фізики конденсованих систем
(повне найменування закладу вищої освіти (наукової
Національної академії наук України, м. Львів прийняла рішення
установи), підпорядкування (у родовому відмінку), місто)
про присудження ступеня доктора філософії галузі знань 10 Природничі науки
(галузь знань)
на підставі прилюдного захисту дисертації "Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням"
(назва дисертації)
за спеціальністю 104 Фізика та астрономія
(код і найменування спеціальності відповідно до Переліку галузей знань і спеціальностей, за якими здійснюється підготовка здобувачів вищої освіти)
" 04 " березня 2024 року.

Гордійчук Володимир Вікторович 1993 року народження,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності) здобувача)
громадянин України
(назва держави, громадянином якої є здобувач)
освіта вища: закінчив у 2015 році Національний університет «Львівська політехніка»
(найменування закладу вищої освіти)
за спеціальністю Прикладна фізика
(за дипломом)

Працює молодшим науковим співробітником в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів
(посада) (місце основної роботи, відомче підпорядкування, місто)
з 2020 р. до цього часу.

Дисертацію виконано у Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів
(найменування закладу вищої освіти (наукової установи), підпорядкування, місто)

Науковий керівник (керівники) Трохимчук Андрій Дмитрович,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності),
доктор фізико-математичних наук, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, старший науковий співробітник відділу теорії м'якої речовини
науковий ступінь, вчене звання, місце роботи, посада)

Здобувач має 8 наукових публікацій за темою дисертації, з них 2 статті у періодичних наукових виданнях інших держав, _____ статей у наукових фахових виданнях України, _____ монографій (зазначити три наукові публікації):
1. Non-hydrodynamic transverse collective excitations in hard-sphere fluids. / V. Hordiichuk, T. Bryk, A. Huerta, and A. Trokhymchuk // The Journal of Chemical Physics. — 2017. — Vol. 147. — 064509
2. Structure and thermodynamics of a short-range Lennard-Jones fluid reference. / V. Hordiichuk, A. Trokhymchuk, J. Skvara, I. Nezbeda// Journal of Molecular Liquids. — 2023. — Vol. 386. — 122483

У дискусії взяли участь голова і члени спеціалізованої вченої ради та присутні на захисті фахівці

1) **Ушкац М.В.**, доктор фізико-математичних наук, професор, Національний Університет Кораблебудування ім. адмірала Макарова, завідувач кафедри інформаційних управляючих систем та технологій, висловив зауваження:
2) 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 мінімумі в радіальної функції розподілу
3) 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).
4) 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.

Плевачук Ю.О., доктор фізико-математичних наук, професор, Львівський національний університет імені Івана Франка, начальник науково-дослідної частини, висловив зауваження:

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 то й 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.

Баумкетнер А.Б., доктор фізико-математичних наук, Інституту фізики конденсованих систем НАН України, провідний науковий співробітник відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем, висловив зауваження:
1) Ще до робіт Званціга в 1954 році теорія збурень була використана в роботах Longuet-Higgins за 1951 рік, Proc. R. Soc. London, 1951, A205, 247. Необхідно додати відповідне цитування.
2) "Єдиним методом статистичної механіки, що дозволяє отримувати результати термодинаміки (наприклад, рівняння стану тощо) в аналітичній формі, що стосується реальних рідин, є термодинамічна теорія збурень" на сторінці 14. Я не згоден з цим твердженням. Є багато інших методів які дозволяють отримати аналітичні результати, наприклад теорія масштабованої частинки, інтегральні рівняння etc.
3) "Об'єктом дослідження є термодинамічні властивості реальних простих плинів з парною міжчастинковою взаємодією Ленарда-Джонса." на сторінці 16. Думаю система твердих сфер теж є об'єктом досліджень.
4) Я не дуже розумію значимості зробленого спостереження, що C_v системи твердих сфер виявилось рівним C_v ідеального газу. Внутрішня енергія обох систем, на відміну від ентальпії, є однаковою. Відповідно, чому похідна по температурі від цієї енергії повинна відрізнятись? Тут добре було б додати пояснюючий коментар. Знову ж таки, це на відміну від ентальпії, чия похідна дає C_p, і яка є відмінною в двох системах. Зрештою C_p можна обчислити з рівняння стану і порівняти C_v/C_p зі значенням отриманим з симуляцій шляхом підгонки.

Ігнатюк В.В., кандидат фізико-математичних наук, Інституту фізики конденсованих систем НАН України, старший науковий співробітник відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем, висловив зауваження:
1) На стор. 40 стверджується, що пряме застосування методології GCM до речовин із твердою серцевиною, якими і є розглядувана система твердими сферами, є дуже складним через неаналітичну форму потенціалу взаємодії. Чи можна стверджувати, що це є настільки вагомою обставиною, щоб дисперсійну криву будувати виключно на основі аналізу максимумів відповідних спектральних функцій, а не власних значень узагальненої гідродинамічної матриці, як це робиться у методі GCM і є значно точнішим при дослідженні спектрів колективних збуджень?

2) Відомо, що крім вищих (за хвильовим числом k) внесків у дисперсію, які, як справедливо зауважено в дисертації, можуть бути як додатними, так і від'ємними, існує позитивний внесок ~ k 5/2 , який для простих рідин можна розрахувати в рамках теорії взаємодіючих мод (mode coupling theory). Що можна сказати про величину таких неаналітичних поправок у випадку рідин, коли молекули моделюються жорсткими сферами з далекосяжною притягальною взаємодією?
3) На Рис. 2.5 автор згадує частоту Френкеля, яка лежить в околі «ротонного мінімуму» відповідних дисперсійних кривих. Хотілося б отримати деякі пояснення фізичного змісту цієї частоти.
4) В області «ротонного мінімуму» (як і в області відповідного максимуму) групова швидкість поздовжних колективних збуджень dω(k)/dk стає рівною нулю. Зазвичай це пояснюється сповільненням поширення утворених хвильових пакетів (груп хвиль) на мікроскопічних відстанях ~1/kmin. Яке пояснення природи таких процесів міг би дати автор у даному випадку, адже як і фазова vф=ω(k)/k, так і групова vгр=dω(k)/dk швидкості при великих k мають радше узагальнений зміст.
5) Рис. 2.5 демонструє дуже цікаве явище: поперечні хвилі в рідині твердих сфер зникають в околі k≥6 аж до випадку найвищої густини, яка розглядалася в роботі. Бажано мати пояснення автора з цього приводу.
6) Значення часової кореляційної функції «ентальпія-ентальпія» Fhh (k→ 0, t=0), зображеної на Рис. 2.7, пов'язане з відповідною статичною кореляційною функцією (СКФ), що визначає питому теплоємність при фіксованому об'ємі Cv. Не зовсім зрозуміло, як з поведінки цієї СКФ при мінімальному значенні хвильового вектора kmin можна судити про зв'язок між колективними збудженнями та теплоємністю Cv у ширшому діапазоні хвильових чисел. Про це стверджується в останньому абзаці підрозділу 2.4.
7) Чи має параметр κ у виразі (3.5) для потенціалу короткосяжного притягання зміст оберненого радіусу першої координаційної сфери? З подальшого обговорення в тексті дисертації такий висновок напрошується.

(прізвища, ініціали, наукові ступені, місця роботи, посади, зауваження)

Результати відкритого голосування:

"За" 5 членів ради,
"Проти" 0 членів ради

На підставі результатів відкритого голосування спеціалізована вчена рада присуджує
Гордійчуку Володимиру Вікторовичу
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності) здобувача у давальному відмінку)
ступінь / ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки
(галузь знань)
за спеціальністю 104 Фізика та астрономія
(код і найменування спеціальності відповідно до Переліку галузей знань і спеціальностей, за якими здійснюється підготовка здобувачів вищої освіти)

Голова спеціалізованої вченої ради _____ Держко О. В.
(підпис) (прізвище, ініціали)

Вчений секретар ІФКС НАН України _____ Бзовська І. С.

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ * ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ * 0554 * УКРАЇНА * м. ЛЬВІВ