Рішення
разової спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Здобувач ступеня доктора філософії Ілля-Микола Іленков, 1998 р.н., громадянин України, освіта вища (закінчив у 2020 р. Національний університет «Львівська політехніка» за спеціальністю «Прикладна фізика та наноматеріали»), аспірант Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р.Юхновського НАН України (Львів), виконав акредитовану освітньо-наукову програму 104 «Фізика та астрономія» 10 «Природничі науки».

Разова спеціалізована вчена рада, утворена наказом директора Інституту фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського НАН України, Львів, від «22» серпня 2025 року № 09, у складі:

- Голови разової спеціалізованої вченої ради - **Ігор Мриглод**, д.ф.-м. н., с.н.с., академік НАН України, головний науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р.Юхновського НАН України;
- Рецензентів - **Тарас Пацаган**, д.ф.-м.н., старший дослідник, заступник директора, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України,

Ярослав Щур, д.ф.-м.н., старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України;

- Офіційних опонентів - **Петро Костробій**, д.ф.-м.н., професор, професор кафедри, Національний університет «Львівська політехніка»,
- **Олег Бовгира**, к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедри, Львівський національний університет імені Івана Франка,

на засіданні «13» жовтня 2025 року прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» Іллі-Миколі Іленкову на підставі публічного захисту дисертації «Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Дисертацію виконано в Інституті фізики конденсованих систем ім. І. Р. Юхновського НАН України, Львів.

Науковий керівник: **Тарас Брик**, доктор фізико-математичних наук, член-кореспондент НАН України, професор, Інститут фізики конденсованих систем ім. І. Р. Юхновського НАН України, директор інституту

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленого рукопису викладеного українською мовою, що повністю відповідає вимогам пункту 6 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 від 12 січня 2022 року № 44 (зі змінами), та містить нові науково-обґрунтовані результати, а саме:

За допомогою використання методів першопринципної молекулярної динаміки, узагальнених колективних мод та чисельного аналізу було виявлено квазі-зв'язані атоми у розплаві стибію, існування яких дало змогу знайти інтерпретацію для уже відомої особливості такого розплаву – плато у дисперсії колективних збуджень в межах першої псевдо-Брілюенівської зони.

Для аналізу високочастотних мод у дисперсії колективних збуджень молекулярного

флюїду водню за високого тиску вперше було запропоновано використання часових кореляційних функцій сприйнятливості густини та першої часової похідної поздовжнього потоку для встановлення невідомих статичних кореляторів та кореляційних часів в межах підходу узагальнених колективних мод.

Використовуючи першопринципні моделювання молекулярної динаміки була встановлена залежність адіабатичної та високочастотної швидкості звуку від густини флюїду водню в області переходу від молекулярного до атомарного стану, де спостерігали плато, котре вказує на перехід неметал-метал у системі водню. Також, вперше було запропоновано спосіб для знаходження парціальних внесків від молекулярної та атомарної компоненти до флуктуації повної густини флюїду використовуючи вагову функцію розподілу за відстанями між протонами у молекулі водню.

Здобувач має 8 наукових публікацій за темою дисертації, з них 2 – статті, які прирівнюються до 3-х статей, оскільки вони опубліковані в журналах віднесених до квартилів Q2 та Q4 згідно класифікації SCImago Journal and Country Rank у рейтингах тих років, в яких були опубліковані відповідні статті, що повністю відповідає вимогам пунктів 8, 9 Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії.

Перелік статей:

1. T. Bryk, I.-M. Ilenkov, A. P. Seitsonen. *Quasi-bound atoms in collective dynamics of liquid Sb* // Journal of Physics: Condensed Matter — 2023. — Vol. 35, no. 15 — P. 154003 https://doi.org/10.1088/1361-648X/acb8f6 (Q2).
2. Ilenkov I.-M., Bryk T. *Ab initio simulation study of collective excitations in a molecular Hydrogen fluid* // Journal of Physical Studies — 2025. — Vol. 25, no. 2. — P. 2601 https://doi.org/10.30970/jps.29.2601 (Q4).

У дискусії взяли участь (голова, рецензенти, офіційні опоненти, інші присутні) та висловили такі зауваження:

Мриглод Ігор Миронович, доктор фізико-математичних наук, академік НАН України, головний науковий співробітник відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем, Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського НАН України, дав позитивну оцінку дисертаційній роботі, без суттєвих зауважень.

Щур Ярослав Йосифович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, висловив зауваження:

1. У розділі 4 розглядається колективна динаміка флюїду водню в області переходу від молекулярного до атомарного стану. При цьому, дві граничні густини 0,2847 та 0,9610 г/см3 відповідають випадкам повністю молекулярного та повністю атомарного водню. В роботі не вказано, хоча б приблизно, яке співвідношення густин молекулярного і атомарного водню є характерним для проміжних густин водню. Вважаю цю інформацію потрібною для кращого розуміння фізики такого явища.
2. У Переліку умовних скорочень (стор. 11), немає скорочень, які використовуються у тексті дисертації, а саме: RDF (стор. 22), RPIMC (стор. 35), NVT (стор. 58), TVE (стор. 59), QBP (стор. 67). При цьому, не всі умовні скорочення пояснені навіть у тексті дисертації.
3. Маю зауваження до якості деяких рисунків. Рисунки містять декілька ліній, зображених у подібній пастельній кольоровій гамі (рис. 3.3, 4.2, 4.5, 4.6a, 4.7, 4.8). Навіть на екрані монітора їх, буває, важко розрізнити. До того ж, підписи до рисунків повинні б містити інформацію, достатню для розуміння рисунка, без потреби шукати пояснення у тексті (напр.

рис. 2.5, 3.6).
4. Не завжди автор вказує посилання на оригінальні статті. Наприклад, на стор. 67 наводяться вирази для автокореляційної функції поздовжнього потоку (2.3) і динамічної змінної (2.4) без належного цитування використаного джерела.
5. Граматичні помилки трапляються, але їх загальна кількість є невеликою і не впливає на, загалом, добре засвоєння викладеного матеріалу

Пацаган Тарас Миколайович, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, дав позитивну оцінку дисертаційній роботі, без зауважень.

Костробій Петро Петрович, доктор фізико-математичних наук, професор, Національний університет «Львівська політехніка», висловив наступні зауваження:
1. У термо-в'язкій моделі узагальненої гідродинаміки коефіцієнти в'язкості, теплопровідності та перехресні коефіцієнти переносу залежать від хвильового вектора. Як це використовується у Ваших розрахунках?
2. З чим на Вашу думку пов'язаний пік автокореляційної функції швидкостей (рис. 3.2) на малих частотах для молекулярного флюїду гідрогену?
3. При дослідженні розподілу атомарної та молекулярної компонент у реакційній моделі флюїду водню очевидно існують дифузійні процеси. Що Ви можете сказати про їх вплив?
4. Не зважаючи на незначну кількість описок в роботі варто було б дотримуватись україномовних позначень осей, зокрема на рис. 3.2, 3.2б, 3.3, 3.5, 3.7, 4.2, 4.4 та 4.9.

Бовгира Олег Вікторович, кандидат фізико-математичних наук, доцент, Львівський національний університет ім. Івана Франка, висловив зауваження:
1. У першому розділі, під час огляду результатів попередніх наукових досліджень, присвячених вивченню структурних та динамічних особливостей рідин з асоціатами, доцільно було б навести ілюстративні графічні матеріали з літературних джерел, а не обмежуватися лише текстовим описом.
2. У висновках до розділу 2 вказано, що збільшення вікна стабільності для QBP навіть на 5 ps веде до суттєвого зростання кількості квазі-зв'язаних пар. Це суперечить твердженням наведеним у пункті 2.3 про те, що збільшуючи відстань відрізання чи зменшуючи "час життя" QBP їхня кількість починає швидко зростати.
3. Радіальна функція розподілу для молекулярного флюїду водню за температури 2500 К (рис. 3.1) демонструє виражений пік при R = 0.75 Å, що порівнюється з даними про внутрішньомолекулярну відстань атомів водню за кімнатної температури (джерело [130]). Наскільки коректно порівнювати результати при температурі 300 К і 2500 К?
4. У роботі першопринципні моделювання рідин з асоціатами виконано за фіксованих температур. Доцільно було б обговорити, яким чином варіювання температури могло б позначитися на отриманих результатах, зокрема на виявлених структурних та динамічних характеристиках систем.
5. Окремі формулювання та терміни, вжиті в дисертації, виглядають певним жаргоном та англіцизмами, зокрема, це стосується таких виразів як «наближення тісного зв'язку» (переклад з tight-binding approximation), «метод проєктор-доповнених хвиль PAW» (усталеного перекладу немає, але здебільшого вживається формулювання «метод приєднаних проекційних хвиль»), «Електронна підсистема поверталась в основний стан в межах теорії функціонала густини», тощо). У тексті дисертаційної роботи одночасно зустрічаються терміни «п'яти змінна» і «п'ятизмінна», «коротко живучі зв'язки» і «короткоживучі зв'язки». Більшість підписів на ілюстративних матеріалах наведені

англійською мовою.

Результати відкритого голосування:

«За» п’ять членів ради,

«Проти» немає.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада присуджує Іллі-Миколі Іленкову ступінь/ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю (спеціальностями) 104 – «Фізика та астрономія».

Відеозапис трансляції захисту дисертації додається.

Голова разової спеціалізованої вченої ради Мриглод Ігор Миронович
ДФ 35.156.009

Вчений секретар
ІФКС ім. І.Р. Юхновського
НАН України І. Бузовська

Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України 05540014 місто Львів Україна