

Рішення
спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Спеціалізована вчена рада ДФ 35.156.007 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 "Особливості колективних збуджень у
бінарних рідинах" _____
(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)
" 26 " лютого 2024 року.

Копча Марія Іванівна _____ 1994 року народження,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності) здобувача)
громадянин України _____,
(назва держави, громадянином якої є здобувач)
освіта вища: закінчила 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 2022 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) Брик Тарас Михайлович,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності),
доктор фізико-математичних наук, професор, Інститут фізики конденсованих систем
Національної академії наук України, директор інституту
науковий ступінь, вчене звання, місце роботи, посада)

Здобувач має 6 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. Bryk T., Kopcha M., Ruocco G. Ab initio study of collective eigenmodes in dynamics of molten salts // Journal of Molecular Liquids. 2023. Vol. 387, P. 122622. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.122622 (Scopus Q1, WoS Q1)

2. Kopcha M., Bryk T., Wax J.-F., Jakse N. Collective dynamics in liquid aluminium oxide: Ab initio analysis of collective eigenmodes // Physical Review B. 2023. Vol. 108. P. 224204. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.224204 (Scopus Q1, WoS Q2)

3. Bryk T., Kopcha M. Propagation gap for shear waves in binary liquids: Analytical and

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

Токарчук М. В., доктор фізико-математичних наук, професор, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, головний науковий співробітник, висловив зауваження:

За проведеними розрахунками є декілька зауважень:

- 1) Ab initio моделювання проведені для іонного розплаву NaCl для температури $T=1262$ К та для оксиду алюмінію $T=2400$ К. Як би зміна температури вплинула б на результати досліджень, зокрема на поведінку колективних мод?
- 2) Вихідні рівняння Ланжевена у 8-ми змінній моделі містять відповідні функції пам'яті у часі, тобто є немарковськими. Де може проявитися немарковість у відповідних ваших моделюваннях?
- 3) Частотний спектр нормованої автокореляційної функції швидкостей для іонного розплаву NaCl в області малих частот має максимум. Яка природа такої поведінки?

Штаблавий І. І., доктор фізико-математичних наук, доцент, Львівський національний університет імені Івана Франка, професор кафедри фізики металів, висловив зауваження:

- 1) В роботі досліджено колективну динаміку в іонних розплавах NaCl та Al_2O_3 . 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.

Слюсаренко Ю. В., доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут", начальник відділу статистичної фізики та квантової теорії поля Інституту теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера, висловив зауваження:

- 1) 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?
- 2) 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)?

Щур Я. Й., доктор фізико-математичних наук, с. н. с., Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, провідний науковий співробітник, без зауважень.

Пацаган Т. М., доктор фізико-математичних наук, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, заступник директора з наукової роботи, без зауважень.
(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
Копчі Марії Іванівні
(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


(підпис)

Пацаган Т. М.
(прізвище, ініціали)

Вчений секретар ІФКС НАН України



Бзовська І. С.