

Рецензія

на дисертацію Іллі-Миколи Іленкова

«Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання»

подану на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки
за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія

Дисертаційна робота Іллі-Миколи Іленкова “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання” присвячена дослідженню колективних збуджень у рідинах з асоціатами, серед яких автор розглядає розплав стибію Sb та флюїд водню H_2 за високих тисків та температур. Дослідження поєднують теоретичний аналіз на основі узагальненої гідродинаміки та метод комп’ютерного моделювання в рамках першопринципної молекулярної динаміки. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (загалом використано 141 джерело) та двох додатків. Другий, третій та четвертий розділи дисертації містять оригінальні наукові результати. Загальний обсяг дисертації становить 132 сторінки.

У вступі сформульовано актуальність теми дослідження, його мету, поставлені задачі та методи дослідження, висвітлено наукову новизну, практичне значення одержаних результатів та особистий внесок здобувача.

Перший розділ дисертації присвячений досить детальному огляду загальних положень колективної динаміки у рідинах. Значної уваги приділено попереднім дослідженням стибію та флюїду водню, де окреслено прогалини та дискусійні питання у дослідженні даних сполук. Подається детальний опис теоретичних основ першопринципної молекулярної динаміки, що включає молекулярну динаміку в рамках наближення Борна-Опенгеймера, теорії функціонала густини та рівняння Кона-Шема. Також, подано короткий опис теоретичного методу дослідження колективної динаміки – методу узагальнених колективних мод (GCM).

Другий розділ дисертаційної роботи присвячений дослідженню колективної динаміки в розплаві стибію (Sb) з короткоживучими асоціатами. Моделювання виконані методом першопринципної молекулярної динаміки. Серед представлених результатів присутні: радіальна функція розподілу $g(r)$ та статичний структурний фактор $S(k)$, середньоквадратичні зміщення атомів стибію, спектральний розподіл автокореляційної функції швидкостей, де можна спостерігати характерну частоту коливань атомів, кореляційні функції густина-густина та потік-потік, а також

дисперсійні криві. Позитивним аспектом є те, що автор порівнює одержані результати з уже наявними експериментальними дослідженнями, прикладом може слугувати дисперсія колективних збуджень та швидкість поширення звуку у розплаві Sb. Автор порівнює характерні частоти у дисперсії колективних збуджень квазі-зв'язаних атомів з частотами одночастинкових коливань встановлених зі спектру автокореляційної функції швидкостей, він припускає, що незначна розбіжність у частотах виникає як наслідок не досконалого методу обчислення автокореляційної функції поздовжнього потоку для квазі-зв'язаних атомів.

У третьому розділі цієї роботи представлено результати *ab initio* моделювання та дослідження колективної динаміки у флюїді молекулярного водню. До поданих результатів належать: радіальна функція розподілу $g(r)$ та статичний структурний фактор $S(k)$, автокореляційна функція швидкостей та її частотний спектр. Запропоновано використання функції лінійного відгуку густини та кореляційної функції перших часових похідних Фур'є-компонент поздовжнього потоку для встановлення внутрішньо молекулярних мод методом узагальнених колективних мод. Порівняння дисперсії колективних збуджень та дисперсії власних значень узагальнених колективних мод у першій псевдо-зоні Бріллюена свідчить про вдалий опис узагальнених акустичних мод в рамках моделі узагальненої гідродинаміки.

У четвертому розділі подані результати дослідження впливу тиску на колективні збудження у флюїді водню. Як і в попередніх розділах, дослідження проводили комбінацією теорії та методу комп'ютерного експерименту. Статичні структурні фактори та радіальні функції розподілу демонструють поступовий перехід від молекулярного до атомарного флюїду так, що за найбільшої досліджуваної густини $\rho = 961 \text{ кг/м}^3$ радіальна функція розподілу має характерний вигляд як для слабо-взаємодійної рідини. Дисперсія колективних збуджень для всіх досліджуваних густин підпорядковується гідродинамічному закону протягом значного діапазону значень хвильових векторів k . Обчислені автором швидкості поширення звуку як функції густини флюїду водню демонструють зростаючу поведінку, за виключенням перегину за густини, де спостерігається майже однакова кількість атомарних та зв'язаних у молекули воднів.

Варто відзначити позитивні риси цієї дисертаційної роботи:

1. Актуальність дослідження флюїду водню за високих тисків, що безпосередньо пов'язано із технологічними питаннями зберігання та транспортування рідкого водню у водневій енергетиці. Хоча в дисертації розглядається флюїд водню за температури 2500 K, що є значно вищим від

криогенних температур, які використовуються для зберігання водню, розуміння загальних закономірностей поведінки флюїду водню при екстремально високих тисках і температурах, безперечно, є актуальним і важливим.

2. В цілому, роботу вирізняє логічне і послідовне представлення отриманих наукових результатів. В першому розділі об'ємом 35 сторінок наведена необхідна інформація для подальшого розуміння матеріалу, викладеного в оригінальних розділах. Мені імпонує такий стиль, оскільки дисертація може бути зрозумілою не тільки для фахівців у вузькій ділянці досліджень. Другий розділ містить розрахункові і аналітичні теоретичні результати колективної динаміки однокомпонентного розплаву Sb із динамічним утворенням 11 пар двоатомних асоціатів. Третій розділ містить результати досліджень складнішого об'єкту - двоатомного молекулярного водню. В четвертому розділі представлено результати ще складнішого об'єкту досліджень – бінарної суміші атомарного та молекулярного водню. Послідовне ускладнення об'єктів досліджень сприяє кращому розумінню отриманих результатів.

3. У дисертації показано межі застосовності теоретичного апарату для аналізу об'єктів, які досліджуються. Застосування п'ятизмінної моделі узагальнених колективних мод дозволяє адекватно описати колективну динаміку розплаву Sb і молекулярного флюїду водню. Проте, використання п'ятизмінної моделі GCM виявляється вже недостатнім для відтворення динамічних характеристик флюїду водню за густин, при яких спостерігається співіснування молекулярної та атомарної компонент водню. Тому в роботі запропоновано розширити GCM модель до восьми змінних, додатково розглядаючи парціальні кореляційні функції густина-густина, потік-потік та перші часові похідні потоку.

4. В результаті проведених досліджень вдалося запропонувати пояснення давно відомому експериментальному факту, який спостерігався в експериментах по непружному розсіянню X-променів на границі псевдо-зони Бриллюена і який досі не знаходив адекватної інтерпретації – існування протяжної пласкої ділянки на дисперсійній залежності колективних збуджень рідкого Sb. Автор дисертації пропонує інтерпретувати це експериментальне спостереження як наслідок утворення квазі-зв'язаних пар йонів Sb, виявлення яких стало одним із головних результатів цієї дисертації.

5. Як можна зрозуміти з дисертації, в роботі вперше було застосовано метод узагальнених колективних мод до молекулярної рідини – флюїду водню (стор.87).

6. Нарешті, мені імпонує лаконічність викладу матеріалу та дещо невимушений стиль дисертації, в якій використовуються яскраві стильові звороти, як-от: «В експериментальній фізиці отримання металічного водню вважається **«Святим**

Граалем» фізики високих тисків» (стор. 33). Або: **«Це здійсмає** питання про те як цей перехід відображається у колективній динаміці...» (стор. 90).

В мене немає суттєвих зауважень, які поставили б під сумнів достовірність використаних методів дослідження, отриманих результатів чи зроблених висновків і рекомендацій для подальших досліджень. Проте, я маю низку технічних зауважень, які не впливають на, загалом, високу наукову якість цієї роботи. А саме:

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 $0,9610 \text{ г/см}^3$ 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), QBR (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, 4.6а, 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.

В цілому, дисертація справляє добре враження як за рівнем отриманих результатів, так і за стилем викладу наукового матеріалу.

Проведені дослідження опубліковані у журналах, що входять до міжнародних наукометричних баз даних Scopus та Web of Science, а саме: британський *Journal of Physics: Condensed Matter* та український *Journal of Physical Studies*, що є свідченням проходження незалежної міжнародної наукової експертизи. Крім того, за матеріалами дисертації опубліковано препринт ще однієї роботи на порталі *arXiv*. Матеріали представлені у дисертації доповідались на трьох Всеукраїнських та двох міжнародних конференціях, а також на семінарі ІФКС ім. І. Р. Юхновського НАН

України. Все вищезгадане є свідченням достовірності наукових результатів та їх фахової апробації в українських та міжнародних наукових колах.

Вважаю, що дисертаційна робота І.-М. Іленкова відповідає вимогам порядку присудження ступеня доктора філософії, відповідно до постанови Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44 зі змінами, внесеними згідно останньої постанови Кабінету Міністрів України № 507 від 3 травня 2024 року, а її автор – Ілля-Микола Іленков заслуговує ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія у галузі знань 10 – Природничі науки.

Провідний науковий співробітник

ІФКС ім. І. Р. Юхновського НАН України,

д. фіз.-мат. наук, ст. н. с.

Ярослав Щур