

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу *Добуш Оксани Андріївни*
«Рівняння стану коміркової моделі плинину»,

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Як відомо, побудова моделей, наближених до реальних фізичних систем, удосконалення існуючих та створення нових методів досліджень є основним напрямком розвитку теоретичної фізики. Тому дисертаційна робота Добуш Оксани Андріївни, метою якої є спроба удосконалення коміркової моделі для опису густих газів і рідин та розв'язання сучасних проблем фазових переходів першого роду, є безумовно актуальною і своєчасною. Ця спроба виявилась успішною, а робота має наукову цінність як у методичному, так і результативному аспектах.

У середині минулого століття були спроби використати коміркову модель - як певне узагальнення ґраткової моделі в теорії твердого тіла — для побудови рівняння стану густих газів і рідин та опису фазових переходів першого роду. Характерною рисою цих робіт було використання формалізму канонічного ансамблю, що призводило до фіксації числа частинок у комірці. При такому обмеженні важко відтворити зміну густини речовини при зміні температури і спроби використання коміркової моделі в такому варіанті виявились невдалими.

Успіх робіт, виконаних дисертанткою разом зі своїм науковим керівником, забезпечений використанням підходу великого канонічного ансамблю, коли відповідає потреба фіксувати число частинок у комірці. Хімічний потенціал при цьому регулює середнє число частинок у системі і тим самим визначає їхнє число у комірці. Застосування такого підходу до відомої раніше моделі надає їй нового змісту, робить актуальною і перспективною для опису фізичних характеристик плиннів. Важливою рисою розвинутого в дисертаційній роботі підходу є можливість опису фазових переходів першого роду як далеко від критичної точки, так і у вузькому околі біля неї, де важливим є врахування далекосяжних флуктуацій.

Завданнями дисертації є вивчення фазової поведінки коміркової моделі плинину, побудова рівняння стану для декількох типів потенціалів взаємодії, а також опис властивостей цієї моделі в надкритичній області температур.

Дисертаційна робота виконана у відділі статистичної теорії конденсованих систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Рукопис складається зі вступу, огляду літератури, трьох оригінальних розділів, висновків, переліку використаних джерел та кількох додатків. Зміст дисертації викладено на 179 сторінках друкованого тексту, з них 148 сторінок – основний текст. Список використаних джерел містить 138 найменувань.

У вступі обґрунтовано актуальність проблеми, вказано об'єкти досліджень та методи їхнього вивчення, викладено мету і завдання досліджень, наукову новизну, практичне значення результатів.

Перший розділ містить огляд літературних джерел, які стосуються опису фазових переходів першого роду у простих однокомпонентних системах. Крім результатів відомих теоретичних підходів, він містить інформацію про можливості числових методів, які останнім часом активно використовуються при прогнозуванні поведінки різних моделей статистичної фізики. Значну увагу приділено стану вивчення надкритичної області температур, де спостерігаються особливості деяких фізичних характеристик, зокрема стисливості.

Другий розділ займає, на мою думку, центральне місце у методі розрахунку коміркової моделі плинину. В ньому проведено точний розрахунок великої статистичної суми моделі з потенціалом Кюрі-Вейса. Відомо, що такого типу потенціали допускають точні розв'язки, оскільки вони не залежать від віддалі. Разом з тим, саме в цьому випадку стає зрозумілою ефективність використання побудованої моделі. На математично строгому рівні встановлено існування критичної температури, області температур, де відбувається фазовий перехід. З'ясовано, що такий перехід відбувається стрибкоподібно, якщо температура системи менша за критичну. Розраховано рівняння стану моделі. Одним із несподіваних результатів розрахунку є наявність каскаду фазових переходів першого роду. Показано, що з ростом хімічного потенціалу, тобто при збільшенні числа частинок, відбувається формування послідовності фаз зі все більшою густиною шляхом фазових переходів першого роду.

У **третьому** розділі досліджено поведінку коміркової моделі плинину для реалістичнішого потенціалу взаємодії, а саме потенціалу Морзе. Цей потенціал часто використовується при описі ряду металічних систем, зокрема в числових розрахунках. Відомі значення параметрів цього потенціалу для конкретних речовин, що і було використано дисертанткою при проведенні розрахунку великої статистичної суми моделі. Слід, однак, зауважити, що насправді проведені розрахунки відповідають наближенню "нульової моди", яке по суті враховує внесок лише від колективної змінної з нульовим значенням хвильового вектора і відповідає наближенню середнього поля. Таке наближення справедливе лише поза околом критичної точки, однак в порівнянні із результатами попереднього розділу, дозволяє прив'язати отримані результати до мікроскопічних параметрів конкретної системи. Запропоновано дві різні методики розрахунку рівняння стану в залежності від форми ефективного потенціалу взаємодії. Перша з них не накладає якихось додаткових умов на форму цього потенціалу. Вона є загальнішою, однак громіздкішою, оскільки передбачає використання проміжного інтегрування в методі колективних змінних. Друга методика такого розрахунку є елегантнішою і дозволяє отримати точне функціональне представлення виразу для великої статистичної суми моделі у вигляді безмежного кумулянтного ряду. Звичайно, конкретні подальші розрахунки проводяться в певних наближеннях, проте залишається можливість загальніших обчислень. Результати, отримані в цьому розділі, дозволяють стверджувати, що використана модель володіє фазовим переходом першого роду, отримане рівняння стану описує стрибок густини, що

впливає із кривої співіснування фаз, знайдена в роботі фазова діаграма вказує на наявність газової та рідинної фаз.

У **четвертому** розділі вивчалася ситуація, коли до уваги приймаються внески від колективних змінних із ненульовими значеннями хвильового вектора. Такий підхід, на відміну від попереднього розділу, дозволяє описати поведінку системи в критичній області температур. При виконанні розрахунків використано розвинутий в школі академіка І.Р.Юхновського метод опису фазового переходу другого роду при наявності зовнішнього поля. Цей метод був модифікований на випадок використання великого канонічного ансамблю. У результаті було знайдено рівняння стану моделі в надкритичній області, розрахована стисливість, запропоновано інтерпретацію причин виникнення лінії Вайдома, яка розділяє рідиноподібну та газоподібну структуру флюїду для температур, вищих за критичну.

Підсумовуючи сказане вище, можна констатувати, що дисертанткою отримано цілу низку нових і цікавих наукових результатів. Вдало вибрано об'єкт дослідження, а саме коміркову модель плинну для опису з єдиних позицій фазової поведінки цієї моделі як в широкому діапазоні температур та густин, так і безпосередньо в околі критичної точки. Дисертантка виконала широкий комплекс аналітичних та числових досліджень.

У дисертаційній роботі метод колективних змінних, розвинутий у теорії класичних рівноважних систем взаємодіючих частинок, узагальнено на випадок коміркових моделей однокомпонентних систем. Вважаю, що це є одним з основних методичних досягнень дисертантки. В роботі практично реалізовано перехід до змінних канонічного ансамблю, чим фактично завершено реалізацію основної ідеї розвинутого підходу. Одержані на цій основі результати щодо фазових переходів є цікавими і новими. Науковий рівень дисертації високий.

В той же час до дисертаційної роботи Оксани Добуш, як до роботи, що має багато нових і оригінальних елементів, хочу зробити деякі зауваження.

1. З тексту другого розділу не цілком зрозуміло, чи дисертантка вважає каскадні переходи реальними, такими, що відповідають експерименту, чи ці переходи є лише проявом обмеженості моделі.

2. У четвертому розділі для прив'язки моделі до реальної фізичної системи, для якої відомі результати комп'ютерного моделювання і експерименту, використано потенціал Морзе для натрію. Очевидно, що цей потенціал відповідає взаємодії нейтральних атомів натрію у газовій фазі. Як інтерпретувати фазу з високою густиною: як діелектрик, чи метал? У металічній фазі система не є однокомпонентною — там присутні іони та колективізовані електрони. Якщо ж перейти до однокомпонентної іонної моделі шляхом засереднення за станами колективізованих електронів, то ефективні міжіонні потенціали вже не будуть описуватись потенціалом Морзе з тими параметрами, що у газовій фазі.

3. Побудова рівняння стану коміркової моделі плинну при всій своїй важливості є лише підготовчим етапом до розрахунку характеристик фазових переходів. З цієї точки зору назва дисертаційної роботи не в повній мірі відповідає суті виконаних досліджень.

Зроблені зауваження не є визначальними і не мають суттєвого впливу на загальну високу оцінку дисертаційної роботи.

Достовірність отриманих в дисертації результатів базується на комплексному використанні сучасних теоретичних методів досліджень. Зроблені в роботі висновки логічно випливають з викладеного в дисертації матеріалу.

Автореферат в повній мірі відображає матеріал, викладений в дисертації. Основні результати дисертації опубліковані у фахових міжнародних та вітчизняних наукових журналах та представлені на наукових конференціях.

Дисертація є закінченою кваліфікаційною науковою роботою, що містить нові обґрунтовані результати відносно вивчення фазової поведінки коміркової моделі плинину. Ці результати є важливим внеском у розвиток сучасної теорії фазових переходів та фізичного матеріалознавства.

Дисертаційна робота «Рівняння стану коміркової моделі плинину» за значенням і новизною отриманих наукових результатів відповідає вимогам ВАК України до кандидатських дисертацій, а її автор Добуш Оксана Андріївна безсумнівно заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Доктор фіз.-мат. наук, професор
кафедри астрофізики Львівського
національного університету
імені Івана Франка


 Ваврух М.В.

12.09.2019 р.

Підпис професора Вавруха М.В. засвідчую:

Вчений секретар Львівського
національного університету
імені Івана Франка, доцент



 Грабовецька О.С.