

## ВІДГУК

Офіційного опонента на дисертаційну роботу

**Пацагана Тараса Миколайовича**

**«ПРОСТОРОВО ОБМЕЖЕНІ ПЛИНИ: РОЗВИТОК ТЕОРЕТИЧНИХ ПІДХОДІВ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ»**

представлену на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук  
за спеціальністю 01.04.24 – фізики колоїдних систем

Величезна кількість природніх та штучних матеріалів, які представляють практичний інтерес, володіють нанопористою структурою. Завдяки значній питомій поверхні пор, вони здатні адсорбувати в себе різноманітні плини: гази, молекулярні рідини, колоїдні суспензії, полімерні розчини, електроліти, тощо. Потрапляючи в такого роду просторові обмеження, плини змінюють свої властивості, в наслідок чого можуть проявлятися нові явища або виникати процеси, які важко передбачити, грунтуючись на звичній поведінці плинів, яка спостерігається в об'ємі.

Пористі матеріали вже багато років широко використовуються у виробництві, зокрема у фільтрація, розділенні сумішей, детектуванні газів, каталізі, збереженні та виробництві енергії, синтезі нових матеріалів тощо. Не зважаючи на те, механізми, що спричиняють зміни властивостей плинів в пористих матеріалах, залишаються недостатньо вивченими. Особливо це стосується фазової поведінки плинів. Впродовж тривалого часу ведуться теоретичні дослідження фазових переходів плинів в різних просторових обмеженнях, разом з тим, розвиваються методи в рамках статистичної теорії рідин, проте, все ще залишається багато невияснених питань. Зокрема, це стосується вивчення молекулярних плинів в невпорядкованій пористій матриці, або іонних рідин, різного роду колоїдних та нематичних систем.

Простіші моделі просторових обмежень описують випадок однієї пори. Найбільш поширеною серед них є модель двох стінок між якими знаходитьться плин. Тут можна знайти більшу кількість результатів як для структурних властивостей плину, так і для фазової рівноваги. Проте, для прикладу, фазова поведінка іонних плинів, ще зовсім донедавна, вивчалася лише для випадку обмеженої примітивної моделі іонних рідин, тобто для моделі іонів із однаковими розмірами і валентностями. Найчастіше в таких порах вивчаються структурні властивості плинів різного роду, в тому числі, коли стінки пори є функціоналізовані полімерними ланцюжками. Для цього, зазвичай, використовується метод функціоналу густини – повністю чисельний метод, або методи комп'ютерного моделювання.

Метою дисертаційної роботи Пацаган Т.М. є дослідження рівноважних властивостей низки модельних плинів в просторових обмеженнях. Основний акцент робиться на фазовій поведінці плинів в невпорядкованій пористій матриці та на структурних властивостях плинів в порі, що обмежена твердими стінками. Дисертація

складається із вступу, шести розділів, списку використаної літератури та додатку, в якому, попри деякі аналітичні викладки, можна знайти список публікацій здобувача.

У вступі автором висвітлено стан проблеми та актуальність дослідження, сформульовано поставлені задачі та відзначено новизну отриманих результатів. У першому розділі робиться огляд літератури по темі дисертації, в якому, зокрема, розглядаються різні аспекти, пов'язані із специфікою впливу пористих середовищ на рівноважні властивості плинів, а також методи, які використовуються для вивчення таких систем та результати, що були отримані за допомогою цих методів.

Результати оригінального дослідження здобувача, представлені в наступних п'яти розділах. Їх можна розділити на два основних блоки, в першому з яких розвиваються і застосовуються теоретичні методи та підходи до вивчення фазових переходів різних модельних плинів в невпорядкованому пористому середовищі, тобто в так званій матриці. На основі цього, побудовано фазові діаграми газ-рідина для простих, асоціативних і асиметричних моделях іонних плинів в матрицях із різною пористістю та різними розмірами матричних частинок. Встановлено, що критична температура та критична густина в цих плинах зменшується зі зменшенням пористості. При цьому, область фазової рівноваги звужується. У випадку асиметричних іонних плинів показано, що асиметрія в розмірах підсилює вплив просторового обмеження, а зарядова асиметрія, при фіксованих інших параметрах, послаблює цей вплив. Щоб вирішити цей блок задач, автором розвивається теорія масштабної частинки для опису системи відліку, яка застосовується при розвиненні теорії збурень, та поєднується із такими теоретичними підходами, як метод колективних змінних та теорія асоціативних рідин. Слід зауважити, що точність опису системи відліку за допомогою теорії масштабної частинки була ретельно перевірена розрахунками комп'ютерного моделювання.

В іншому блокі здобувач вивчає структурні властивості плинів в порі, що обмежена твердими стінками. Застосовуючи теоретико-польовий підхід та комп'ютерне моделювання, ним розглянуто декілька цікавих моделей плинів, міжчастинкова взаємодія яких характеризується м'яким відштовхуванням та різного роду притяганням, зокрема, типу осцилюючого юкавівського потенціалу та орієнтаційно-залежного потенціалу типу Майєра-Заупе для нематичного плину. Розрахунок профілів густини розглянутих плинів показав суттєві переваги гаусівського наближення у порівнянні із наближенням середнього поля. При описі коефіцієнта адсорбції встановлено можливість немонотонної залежності його від температури і густини. Також відмічено немонотонну залежність профілю густини для контактного значення із зміною температури, що пов'язується із м'якістю відштовхувальної взаємодії між частинками плину. Особливо це добре видно у випадку нематичного плину.

Дисертаційна робота Пацагана Т.М. є цікавою тим, що в ній розглядаються теоретичні підходи, які дають змогу отримати аналітичні вирази для властивостей плинів в просторових обмеженнях. Так, у випадку плинів в невпорядкованій матриці, ним запропоновано аналітичні вирази для хімічного потенціалу та тиску, на основі яких можна знайти фазову рівновагу газ-рідини для простих, асоціативних та іонних плинів. У випадку плинів із потенціалом взаємодії типу подвійного Юкави між двома твердими стінками, також використовуються аналітичні вирази для розрахунку профілю густини. Лише в одному із розділів Пацаган Т. використовує виключно метод комп'ютерного моделювання для опису процесів формування мезоструктур в двокомпонентному плині органічних сполук, який знаходиться між стінками, функціоналізованими полімерними щітками.

Матеріал дисертаційної роботи чітко викладений і містить багато цікавих та корисних результатів, що вже знаходять своє застосування у роботах інших дослідників.

Дисертаційна робота є цілісним і завершеним дослідженням, результати якого опубліковані в 22 статтях у фахових реферованих журналах, які індексовані у Scopus і Web of Science (WoS), і 1 розділі монографії. Також результати представлялися на багатьох міжнародних конференціях. У авторефераті висвітлено всі основні положення та висновки дисертаційної роботи.

Вважаю, що дисертаційна робота Пацагана Тараса Миколайовича «Просторово обмежені плини: розвиток теоретичних підходів та комп'ютерне моделювання» повністю відповідає всім вимогам МОН України щодо докторських дисертацій, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.24–фізики колоїдних систем.

#### Офіційний опонент:

академік НАН України,  
доктор фіз.-мат. наук, професор,  
начальник відділу теорії конденсованих середовищ та ядерної матерії,  
Інституту теоретичної фізики ім. І.О. Ахієзера  
Національного наукового центру  
«Харківський фізико-технічний інститут»

*О.С. Бакай*

О.С. Бакай

*Підпис О. С. Бакай підтверджує: Да*  
*Зас. Директора ІТФ ННЦ ХФТІ Л.М. Задидов*

