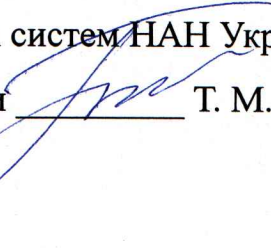


Затверджую

Директор Інституту
фізики конденсованих систем НАН України
член-кор. НАН України  Т. М. Брик



ВИТЯГ

з протоколу № 1273 фахового семінару

Інституту фізики конденсованих систем НАН України

від 26 червня 2025 р.

1. **ПРИСУТНІЙ** 41 працівник Інституту фізики конденсованих систем НАН України, а саме:

1. Ірина Степанівна БЗОВСЬКА, кандидат фізико-математичних наук, вчений секретар
2. Вікторія Богданівна БЛАВАЦЬКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем
3. Тарас Михайлович БРИК, член-кореспондент НАН України, професор, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України
4. Галина Анатоліївна БУТОВИЧ, аспірантка
5. Андрій Степанович ВДОВИЧ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
6. Олег Володимирович ВЕЛИЧКО, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник

7. Тарас Михайлович ВЕРХОЛЯК, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
8. Христина Аркадіївна ГАЙДУКІВСЬКА, доктор фізико-математичних наук, наукова співробітниця
9. Тарас Валентинович ГВОЗДЬ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
10. Тарас Юрійович ГОЛОВАЧ, доктор філософії, молодший науковий співробітник
11. Мирослав Федорович ГОЛОВКО, член-кореспондент НАН України, професор, головний науковий співробітник
12. Юліан-Іван-Михайло Назарович ГОНЧАР, доктор філософії, молодший науковий співробітник
13. Тарас Ігорович ГУТАК, доктор філософії, молодший науковий співробітник
14. Тарас Васильович ДЕМЧУК, доктор філософії, науковий співробітник
15. Олег Володимирович ДЕРЖКО, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу квантової статистики
16. Оксана Андріївна ДОБУШ, кандидат фізико-математичних наук, наукова співробітниця, докторантка
17. Юрій Ігорович ДУБЛЕНИЧ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник
18. Олександр Львович ІВАНКІВ, кандидат фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи
19. Василь Васильович ІГНАТЮК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник

20. Ярослав Миколайович Ільницький, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем
21. Ігор Володимирович ЇДАК, аспірант
22. Остап Юрійович КАЛЮЖНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник
23. Михайло Павлович КОЗЛОВСЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник
24. Марія Іванівна КОПЧА, доктор філософії, молодша наукова співробітниця
25. Іван Ярославович КРАВЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
26. Тарас Євстахійович КРОХМАЛЬСЬКИЙ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
27. Олеся Михайлівна КРУПНІЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, наукова співробітниця
28. Богдан Михайлович ЛІСНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
29. Ігор Миронович МРИГЛОД, академік НАН України, головний науковий співробітник
30. Оксана Вадимівна ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, провідна наукова співробітниця
31. Тарас Миколайович ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи, завідувач відділу теорії м'якої речовини
32. Ігор Васильович ПИЛЮК, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник

33. Роман Васильович РОМАНІК, кандидат фізико-математичних наук,
науковий співробітник
34. Петро Васильович САРКАНИЧ, кандидат фізико-математичних наук,
науковий співробітник
35. Роман Ярославович СТЕЦІВ, кандидат фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
36. Михайло Васильович ТОКАРЧУК, доктор фізико-математичних
наук, професор, головний науковий співробітник
37. Андрій Дмитрович ТРОХИМЧУК, доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник
38. Андрій Михайлович ШВАЙКА, доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник
39. Ярослав Йосифович ЩУР, доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник
40. Юрій Григорович ЯРЕМКО, доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник
41. Дмитро Любомирович ЯРЕМЧУК, доктор філософії, молодший
науковий співробітник, докторант

З присутніх 19 докторів наук, 6 докторів філософії та 14 кандидатів наук (фахівців за профілем поданої дисертації). Голова засідання академік НАН України, головний науковий співробітник І. М. МРИГЛОД.

2. СЛУХАЛИ доповідь аспіранта відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Іллі-Миколи Анджейовича ІЛЕНКОВА за матеріалами дисертаційної роботи “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання”, поданої на

здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – “Фізика і астрономія”.

Науковий керівник – член-кореспондент НАН України, професор, директор Інституту фізики конденсованих систем Тарас Михайлович БРИК.

Тему дисертації затверджено 29 травня 2025 року на засіданні вченої ради Інституту фізики конденсованих систем НАН України протокол № 50.

Робота була виконана у відділі комп’ютерного моделювання багаточастинкових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

За змістом доповіді були поставлені запитання, на які доповідач дав правильні та обґрунтовані відповіді:

Академік НАН України І. М. Мриглюд:

1. Якщо повернутись до попереднього графіка, де зображена фазова діаграма водню, чому відповідає штрих-пунктирна крива, що знаходиться близько осі температур?

Відповідь: Це є крива Югоніо, її використовують для визначення термодинамічних параметрів в експериментальних дослідженнях.

Зауваження від Т.М. Брика: Лінія Югоніо відповідає співвідношенню температури та тиску у експериментах з використанням ударної хвилі, де досліджувана система не перебуває в стані рівноваги.

2. Дана крива знаходиться на фазовій діаграмі, чи вказує вона на якийсь перехід у системі?

Відповідь: Ні, вона є важливою для експериментаторів, оскільки вона задає співвідношення між тиском та температурою у нерівноважних вимірюваннях.

3. Тобто це не є лінія зміни фазового стану системи, а це є лінія вздовж якої експериментатори можуть здійснювати дослідження використовуючи таку методику?

Відповідь: Так.

Д. ф.-м. н., провідний науковий співробітник А. Д. Трохимчук:

1. У Вас в заголовку роботи присутня назва «рідини з асоціатами». Чи правильно я розумію, що Ваша асоціація є трішки інша від асоціації в контексті теорії м'якої речовини?

Відповідь: Так, наша асоціація відбувається на рівні електронного зв'язку.

Академік НАН України І. М. Мриглов:

2. В продовження до цього питання, я хотів би, щоб ви уточнили чи виникають асоціати в обох ділянках на фазовій діаграмі водню?

Відповідь: Ні, короткоживучі асоціати виникають тільки в перехідній області, вона умовно позначена на фазовій діаграмі червоним кольором.

3. Тобто у Ваших симуляціях статистичних асоціатів в сенсі кейдж-ефектів чи ближнього порядку в молекулярному водні Ви не виявили?

Відповідь: Ні.

Д. ф.-м. н., головний науковий співробітник М. В. Токарчук:

1. Чи присутність квазі-зв'язаних атомів у стибію якимось чином впливає на в'язкість та теплопровідність у системі?

Відповідь: Ми не проводили обчислення в'язкості та теплопровідності нашої системи, тому вплив квазі-зв'язаних атомів на дані параметри ми не можемо оцінити.

Д. ф.-м. н., заступник директора з наукової роботи Т. М. Пацаган:

1. Чи спостерігали Ви в моделюваннях у квазі-зв'язаних атомів стибію обертальні рухи?

Відповідь: Ні, для цих атомів ми не спостерігали ні нормальних ні ротаційних мод.

Член-кор. НАН України М. Ф. Головка:

1. Чи досліджувалась залежність тиску у системі від кількості квазі-зв'язаних атомів стибію?

Відповідь: Ні, такої залежності ми не досліджували.

Академік НАН України І. М. Мриглюд:

1. Запитання до застосованої Вами термо-в'язкопружної моделі. Яким способом враховувались флуктуації енергії в системі?

Відповідь: Змінні, що містили флуктуації енергії, чи її часові похідні знаходили шляхом підгонки до кореляційних функцій одержаних з першопринципного моделювання.

2. Відносно критерію виділення асоціатів. Критерій відбору квазі-зв'язаних атомів стосувався тільки двох частинок?

Відповідь: Так, але при часовому аналізі ми розглядали усі частинки одночасно.

3. Чи можна говорити про те, що Ви свого роду фіксували появу димерів?

Відповідь: Фактично так, але ми вважали їх радше квазі-зв'язаними, оскільки вони демонстрували відносно короткий час життя.

4. Чи можна тоді інтерпретувати цю частоту у спектрі автокореляційної функції швидкостей як частоту гармонічних коливань?

Відповідь: Певною мірою так, але даний спектр радше відображає одночастинкові коливання, а не колективні ефекти.

5. Чи можете ви стверджувати, що вага вкладу цієї пропагаторної моди квазі-зв'язаних атомів є певною мірою пропорційна до концентрації зафіксованих Вами статистичних димерів?

Відповідь: Ні, для цього нам необхідно досліджувати цю ж систему за інших термодинамічних параметрів, де буде інша фракція квазі-зв'язаних атомів.

Д. ф.-м. н., заступник директора з наукової роботи Т. М. Пацаган:

1. Якщо Ви спостерігали димери у Вашій системі, чи спостерігали тримери?

Відповідь: Ні, тримерів ми не спостерігали.

2. Яка частка системи вважалась димерами?

Відповідь: Ми спостерігали, в середньому, десять пар квазі-зв'язаних атомів.

3. Для моделювання стибію Ви використовували часовий крок моделювання 3 fs, а у випадку водню 0.2 fs. Яким критерієм ви користувались для вибору часового кроку у Ваших моделюваннях?

Відповідь: З огляду на те, що атоми водню є значно легші, їхні рухи є значно швидші в порівнянні з атомами стибію, тому для спостереження правильної динаміки, в тому числі нормальних мод, нам необхідно використовувати менший часовий крок в порівнянні з системою розплаву стибію.

Д. ф.-м. н., головний науковий співробітник М. В. Токарчук:

1. Чи проводили Ви дослідження в'язкості та теплопровідності для системи молекулярного водню?

Відповідь: Ні, таких обчислень ми не проводили.

Академік НАН України І. М. Мриглов:

1. Чи Ви використовуєте аналогічний критерій, як для стибію, розділення частинок на молекулярні та атомарні в розділі присвяченому молекулярному водню?

Відповідь: Для випадку повністю молекулярного водню, наші молекули не дисоціювали, тому потреби у розділенні не було.

Д. ф.-м. н., заступник директора з наукової роботи Т. М. Пацаган:

1. Я розумію, що у випадку атомів водню між ними утворюється ковалентний зв'язок. Чи досліджувана система не перебуває у хімічній рівновазі, і зв'язування та розв'язування молекул відбувається абсолютно у не корельований спосіб?

Відповідь: Для кожної густини за якої відбувався процес асоціації та дисоціації, ми не спостерігали сталої зміни концентрації компонент у системі. Тому ми вважаємо, що система перебуває у хімічній рівновазі.

2. Стосовно зміни форми радіальної функції розподілу водню, як Ви інтерпретуєте вигляд цієї функції для найбільшої досліджуваної густини системи?

Відповідь: Спостережуване плато вказує на слабо взаємодіючу систему, і відповідає повністю дисоційованому водню в якому відбулась металізація.

3. Чи проводили Ви також часовий аналіз для цієї повністю дисоційованої системи? Можливо Ви спостерігали там якусь невелику частку зв'язаних воднів?

Відповідь: Так, ми проводили часовий аналіз і для цієї системи, проте утворення молекул водню ми не спостерігали за цієї густини.

К. ф.-м. н., старший науковий співробітник В. В. Ігнатюк:

1. Для обчислених Вами дисперсійних залежностей можна спостерігати достатньо довгу область де дисперсія слідувала гідродинамічному

закону. Чи пробували ви дослідити залежність від густини системи хвильових чисел, при яких порушувався цей гідродинамічний закон?

Відповідь: Ні, таких обчислень ми не проводили.

Д. ф.-м. н., професор, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Я. М. Ільницький:

1. Ви використовували критерій для стійкості димерів у водні у вигляді 70 часових кроків моделювання. Чи вважаєте Ви, що даний критерій необхідно змінювати залежно від густини системи?

Відповідь: Так, для різних густин час зіткнення молекул буде різним. 70 часових кроків відповідають системі де тільки розпочинається дисоціація.

Член-кор. НАН України М. Ф. Головка:

1. Чи пробували Ви застосувати закон діючих мас для систем де спостерігалась дисоціація?

Відповідь: Ні, ми не використовували хімічні потенціали. Ми розділяли внески від молекулярної та атомарної компонент тільки використовуючи розподіл за відстанями між атомами водню.

3. ВИСТУПИ ПРИСУТНІХ

З оцінкою дисертаційної роботи аспіранта відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Іленкова І.-М. А., виступили:

Д. ф.-м. н., професор, головний науковий співробітник **М. В. Токарчук:** Ілля продемонстрував високий рівень володіння набутими навичками та знаннями

в галузі гідродинаміки та молекулярної динаміки, а також впевнено представив результати своєї роботи. Проведені ним дослідження є особливо цікавими з огляду на термодинамічні умови, за яких виконувались моделювання: для випадку водню це тиски до сотень гігапаскаль, що є важливим для досліджень фізики конденсованого стану. Вважаю за доцільне підтримати дану дисертаційну роботу, та рекомендувати її до подальшого захисту.

Член-кор. НАН України, професор, директор інституту, науковий керівник роботи **Т. М. Брик**: В даній роботі був представлений ряд важливих одержаних результатів, до яких належать: пояснення природи пласкої області у дисперсії колективних збуджень в розплаві стибію через аналіз протифазних рухів квазі-зв'язаних атомів; вперше запропонований спосіб розділення атомарної та молекулярної компонент у флюїді водню з наявною дисоціацією та асоціацією; вперше використовувались, для знаходження невідомих кореляційних часів та статичних кореляторів у GCM моделі, кореляційні функції уявної частини функції лінійного відгуку густини та перших часових похідних потоку густини, що дало змогу відтворити внутрішньо молекулярні моди у системі водню. Тому, я вважаю, що в дана робота містить важливі наукові результати, дисертаційна робота уже є фактично закінчена, відтак пропоную схвалити цю роботу до захисту.

Д. ф.-м. н., заступник директора з наукової роботи, завідувач відділу теорії м'якої речовини **Т. М. Пацаган**: Дуже гарна доповідь. Ілля впевнено себе почуває з матеріалом, який був ним опрацьований. Присутня чітка структура доповіді, добре представлені результати та висновки до даної роботи.

Особливо приємно бачити, що присутній взаємозв'язок між розділами дисертаційної роботи: проблема димеризації досліджувалась у першому розділі для випадку розплаву стибію, тоді як асоціація та дисоціація молекул водню розглядалась у наступних розділах дисертації. Задача є дуже цікавою, проблематика є актуальною та присутній цілий горизонт для проведення подальших досліджень. Тому, я вітаю Іллю та Тараса Михайловича з гарною роботою та закликаю підтримати висновок про дисертаційну роботу.

Член-кор. НАН України, професор **М. Ф. Головка**: Дуже добра робота. В межах рівноважної системи використовувався атом-атомний підхід, де враховувались внутрішньо молекулярні та міжмолекулярні кореляції. Такий підхід був розроблений для аналізу динамічних характеристик у розплаві стибію та флюїду водню. Дана робота є перспективною для подальших досліджень. Тому, я вважаю, що ця робота заслуговує того, щоб підтримати її у якості дисертаційної роботи та допустити цю роботу до захисту.

Д. ф.-м. н., професор, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем **Я. М. Ільницький**: Доповідь добре структурована, Ілля добре представляє одержані результати. Він добре оволодів методами комп'ютерного експерименту та чисельного аналізу даних. В роботі були представлені важливі результати, зокрема нелінійна залежність адіабатичної та високочастотної швидкості звуку від густини системи флюїду водню в області дисоціації. Хочу підтримати дану дисертаційну роботу, дати позитивний висновок та побажати успіхів в подальших дослідженнях.

Академік НАН України, головний науковий співробітник **І. М. Мриглюд**: На сам перед хочу зазначити, що дана доповідь була спокійною та зваженою. Ілля правильно реагував та відповідав на поставлені питання, що свідчить про його кваліфікаційну зрілість. Вартує зазначити, що поява бездисперсійної області у спектрі колективних збуджень, як для бінарних рідин, може бути наслідком впливу оптичної моди, котра деформуватиме низкочастотну гілку. Результати даної роботи є дуже цікавими, присутні перспективи для подальших досліджень, що можуть включати аналіз динаміки хімічно реагуючих систем. Цілком підтримую дану роботу в якості дисертаційної роботи та схилью до позитивного висновку.

Д. ф.-м. н., провідний науковий співробітник **А. Д. Трохимчук**: Добре сформована доповідь. Ілля опанував методики узагальненої гідродинаміки та комп'ютерного експерименту. Незважаючи на те, що він проводив дослідження колективних динамічних характеристик, він на початку кожного авторського розділу подавав статичні структурні фактори та радіальні функції розподілу, що є дуже важливим для встановлення взаємозв'язку між комп'ютерними симуляціями та реальними експериментами. В цілому, я рекомендую дану роботу для допуску до захисту дисертації.

4. ЗАСЛУХАВШИ ТА ОБГОВОРІВШИ ДОПОВІДЬ Іллі-Миколи Анджейовича Іленкова, а також за результатами попередньої експертизи представленої дисертації на фаховому семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України, прийнято наступні висновки щодо

дисертаційної роботи “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання”.

ВИСНОВОК

фахового семінару зі спеціальності Інституту фізики конденсованих систем НАН України про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання”

здобувача вищої освіти ступеня доктора філософії Іллі-Миколи Анджейовича Іленкова за спеціальністю 104 – “Фізика і астрономія”

4.1. Актуальність теми дисертації

Вивчення колективної динаміки у рідинах є принципово важливим напрямом дослідження фізики конденсованого стану, оскільки вона забезпечує взаємозв'язок між мікроскопічними характеристиками речовини та макроскопічними величинами, які спостерігаються в реальних експериментах. Особливий інтерес становлять рідини зі складною міжчастинковою взаємодією чи електронною підсистемою, що здатні утворювати асоціати. Колективна динаміка таких систем на сьогодні вивчена недостатньо, що викликає потребу у подальших дослідженнях задля заповнення цієї наукової прогалини. Дослідження рідин, що формують асоціати, на даному етапі досі перебувають в зародковому стані. Утворення та розрив хімічних зв'язків на

електронному рівні у симуляціях можна спостерігати тільки методом *ab initio* молекулярної динаміки. Тому, такі моделювання можуть виступати у ролі комплементарних методів до уже наявних теоретичних та експериментальних досліджень.

Проблема створення аналітичного чи феноменологічного підходу для встановлення структурних та динамічних особливостей рідин з асоціатами та наявною дисоціацією чи асоціацією є досі не вирішеною. Дана робота робить крок у напрямку поєднання методу комп'ютерного експерименту та теорії узагальненої гідродинаміки, в межах досліджень рідин з асоціатами.

4.2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами інституту та відділу

Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України. Виконання дисертаційних досліджень здійснювались в межах проєкту Національного фонду досліджень України “Встановлення природи незвичних колективних властивостей неупорядкованих систем: Теорія та першопринципне моделювання” (реєстраційний номер: 2020.02/0115; номери держреєстрації: № 0120U104922, № 0121U111728, № 0123U103903), Гранту НАН України дослідницьким лабораторіям/групам молодих вчених НАН України для проведення досліджень за пріоритетними напрямами розвитку науки і техніки 2024-2025 рр. “Особливості динамічної структури неупорядкованих систем: теорія та *ab initio* моделювання” (реєстраційний номер: 09/01-2024(5), номер держреєстрації: № 0124U002074). Роботи також виконувались в рамках конкурсної стипендії НАН України для молодих вчених 2023-2025 р.

4.3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

Постановка наукової задачі, формулювання загальної мети, напрямів та методів дослідження здійснені науковим керівником – членом-кореспондентом НАН України, доктором фізико-математичних наук, професором Бриком Т. М. До особистого внеску автору дисертації належить:

- Проведення першопринципного моделювання розплаву стибію та флюїдів водню за ряду густин;
- розрахунок часових кореляційних функцій густина-густина та потік-потік, обчислення їхніх спектрів та аналіз часової еволюції відстані між найближчими атомами стибію для знаходження короткоживучих асоціатів у даному розплаві; встановлення дисперсії колективних мод у розплаві Sb;
- розрахунок автокореляційних функцій швидкостей, функції відгуку густини та кореляційної функції похідних поздовжнього потоку; побудова та аналіз дисперсії поздовжніх колективних мод; застосування методу GCM до молекулярного флюїду водню;
- розрахунок статичних структурних факторів, дисперсій акустичних мод флюїду водню в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду; застосування методу GCM до атомарного флюїду водню; аналіз часових кореляцій густини та потоку для флюїду водню в області дисоціації молекул; аналіз часової еволюції найближчих сусідів для атомів водню; знаходження парціальних внесків від молекулярної та атомарної складових до часових кореляційних функцій представлених у роботі.

4.4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Використаний спосіб обчислення коефіцієнту дифузії розплаву стибію через лінійну асимптоту функції середньоквадратичного зміщення та інтегралу Кубо

узгоджуються в межах похибки, та дають значення коефіцієнту дифузії, що є спів мірним до попередніх експериментальних досліджень. Одержана дисперсійна крива колективних збуджень, обчислена з положень піків спектрального розподілу кореляційної функції потік-потік, добре узгоджуються з попередніми експериментальними та симуляційними дослідженнями.

Положення піку радіальної функції розподілу для молекулярного флюїду водню відповідає відомому значенню середньої відстані між атомами водню у молекулі H_2 . Обчислені величини швидкості поширення звуку у водні для ряду густин знаходяться у адекватному діапазоні та добре відображають пружні характеристики флюїдів водню.

Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертаційній роботі, є повністю обґрунтованими

4.5. Ступінь новизни основних результатів дисертаційної роботи порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

В даній дисертаційній роботі вперше було:

- виявлено квазі-зв'язані атоми у розплаві стибію, та встановлено їхню роль у структурних та динамічних особливостях такого розплаву. Шляхом застосування методу GCM було виявлено дві вітки колективних збуджень, одна з яких відповідала розширеній пласкій області в дисперсії акустичних мод;
- запропоновано використання часової кореляційної функції сприйнятливості густини та похідної поздовжнього потоку для знаходження невідомих статичних кореляторів та кореляційних часів в узагальненій гідродинамічній матриці, що дало змогу вдало відтворювати високочастотні та акустичні колективні моди у дисперсії колективних збуджень молекулярного флюїду за високого тиску;

- отримано залежність адіабатичної та високочастотної швидкості звуку від густини флюїду водню, для яких спостерігались плато в області де відбувається перехід від молекулярного до атомарного флюїду. Запропоновано підхід для отримання парціальних внесків від молекулярної та атомарної компоненти до флуктуації повної густини флюїду, що є необхідним для дослідження динаміки флюїдів з дисоціацією.

4.6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

За матеріалами дисертації опубліковано 8 наукових праць, серед яких: 2 статті у фахових наукових виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science [1,2], одного препринта [3], та у 5 тезах конференцій [4-8].

Статті:

1. Bryk T., Ilenkov I.-M., Seistonen A. Quasi-bound atoms in collective dynamics of liquid Sb // Journal of Physics: Condensed Matter 2023. Vol. 35 P. 154003;
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;
3. Ilenkov I.-M., Bryk T. Collective excitations in Hydrogen across the pressure-induced transition from molecular to atomic fluid // arXiv preprint:2506.20791, 2025;

Тези конференцій:

4. Іленков І.-М. А., Брик Т. М. Динамічна структура водневих флюїдів в області переходу від молекулярного до атомарного флюїду // XXII Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії

конденсованої речовини, 24–25 Листопада, 2022. Тези доповідей. Львів, 2022. С. 29.

5. Ilenkov I. -M., Bryk T. Study of fluid H₂ under high pressure: A Generalized collective mode approach // IX Міжнародна наукова конференція “Фізика невідпорядкованих систем”, 19–20 Вересня, 2023. Тези доповідей. Львів, 2023. Р. 7.

6. Іленков І.-М. А., Брик Т. М. Дослідження динамічних характеристик водневого флюїду в області переходу від молекулярного до атомарного стану // XXIII Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 26–27 Жовтня, 2023. Тези доповідей. Львів, 2023. С. 21.

7. Kopcha M., Demchuk T., Ilenkov I.-M., Bryk T. Ab initio analysis of collective dynamics in ionic and metallic melts // 12th Liquid Matter Conference, September 23–27, 2024. Book of Abstract. Mainz, 2024. Р. 105.

8. Іленков І.-М. А., Брик Т. М. Особливості динамічних характеристик водневого флюїду з наявною дисоціацією та асоціацією // XXIV Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 24–25 Жовтня, 2024. Тези доповідей. Львів, 2024. С. 26.

4.7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо

Результати дисертаційної роботи доповідались та обговорювались на трьох Всеукраїнських та двох міжнародних конференціях, серед яких: XXII, XXII, XXIV Всеукраїнські школи-семінар молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2022-2024 рр.), IX Міжнародна наукова конференція “Фізика невідпорядкованих систем” (Львів, 2023 р.) та 12th Liquid Matter Conference (Mainz, 2024 р.). Окрім того, результати подавались на

семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів, 2025 р.) та вчених радах Інституту фізики конденсованих систем в межах обов'язкових щорічних та семестрових звітностей аспіранта (Львів 2022-2025 рр.)

4.8. Наукове значення виконаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів в програмі навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

Наукова цінність отриманих результатів полягає у новому трактуванні причини існування пласкої області у дисперсії колективних збуджень у розплаві стибію та знаходженні способу виявлення квазі-зв'язаних атомів шляхом часового аналізу результатів проведених моделювань молекулярної динаміки. Для молекулярного флюїду водню, принципова цінність отриманих результатів полягає у запропонованому використанні кореляційних функцій відгуку густини та перших похідних потоку у схемі узагальнених колективних мод задля визначення правильної динаміки внутрішньомолекулярних мод; знайдені величини високочастотної та адіабатичної швидкості поширення звуку у водні є важливими для опису хвильових процесів у водні за високих тисків, що є компонентом атмосфери газових гігантів. Встановлена нелінійна залежність адіабатичної та високочастотної швидкості поширення звуку від густини водню може слугувати маркером переходу до металічного водню. Ці дослідження дозволяють глибше зрозуміти природу колективних збуджень у рідинах з асоціатами та дозволяють отримати фізичні величини у системах, що недоступні для аналізу класичними експериментальними методами.

4.9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства, або галузі народного господарства, де вони можуть бути застосовані

Отримані результати мають важливе значення для експериментальних груп, які займаються дослідженнями спектроскопії з використанням непружного

розсіювання рентгенівських променів, зокрема таких провідних дослідницьких колективів, як група A. Baron та S. Nasokawa (Японія, Spring-8) і група T. Scorigno (Італія, Рим). З огляду на складну природу колективної динаміки в рідинах з асоціатами, результати цієї роботи надають теоретично обґрунтований метод для інтерпретації експериментальних спектрів непружного розсіювання рентгенівських променів. Запропоновані методики дозволяють розрізнити внески релаксаційних та пропагаторних мод у колективних збудженнях, а також дають змогу здійснити правильне трактування результатів одержаних із експерименту. Таким чином, робота надає «рецепт» для аналізу динаміки рідин з асоціатами, що дає змогу глибше розуміти як структурні, так і динамічні особливості у таких системах. Окрім того, отримані результати можуть слугувати основою для проведення нових експериментів та сприяти встановленню взаємозв'язку між теоретичними та експериментальними дослідженнями у фізиці конденсованого середовища.

4.10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертаційна робота має логічну структуру. Вона складається зі вступу, розділу присвяченому огляду літератури, трьох оригінальних розділів, висновків, списку використаних джерел та двох додатків.

Дисертація за структурою, мовою та стилем відповідає вимогам Міністерства освіти і науки України.

В ході обговорення дисертаційної роботи, до здобувача не було висунуто жодних зауважень щодо роботи.

4.11. Відповідність дисертації паспорту спеціальності, за якою вона представлена до захисту

Дисертація є самостійною науково-дослідною роботою. Робота є виконаною на високому науковому рівні та є актуальною в контексті сучасних досліджень.

Автор має необхідні професійні навички та знання. Робота відповідає спеціальності 104 – “Фізика і астрономія”.

5. З урахуванням вище зазначеного, на фаховому семінарі зі спеціальності 104 – “Фізика і астрономія” Інституту фізики конденсованих систем НАН України ухвалили:

5.1. Дисертаційна робота Іллі-Миколи Анджейовича Іленкова на тему “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання” є завершеною науковою працею, у якій розв’язані актуальні наукові завдання: 1) а) проведено часовий аналіз розплаву стибію, в результаті якого були знайдені атоми, що демонстрували квазі-зв’язану поведінку; б) встановлено роль квазі-зв’язаних атомів розплаву стибію у дисперсії колективних збуджень; 2) вперше застосовано лінійну функцію відгуку густини та кореляцій перших часових похідних функцій потік-потік для знаходження правильної дисперсійної кривої колективних збуджень у флюїді водню за високих тисків використовуючи метод узагальнених колективних мод; 3) знайдено нелінійну залежність швидкості поширення звуку у водні від густини системи, що є свідченням переходу від молекулярного до атомарного стану та може слугувати маркером для початку переходу метал-неметал.

5.2. Матеріали дисертації І.-М. А. Іленкова повністю висвітлені у 8 наукових публікаціях, з них 2 статті включено до міжнародних наукометричних баз.

5.3. Дисертація І.-М. А. Іленкова відповідає вимогам наказу МОН України №40 від 12.01.2017 р. “Про затвердження вимог до оформлення дисертації”, Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженому Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. №44.

5.4. З урахуванням наукової зрілості та професійних якостей І.-М. А. Іленкова, дисертаційна робота “Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання” рекомендується до подання до розгляду та захисту на спеціалізованій вченій раді.

За затвердження висновку проголосували:

за – 41 (одностайно)

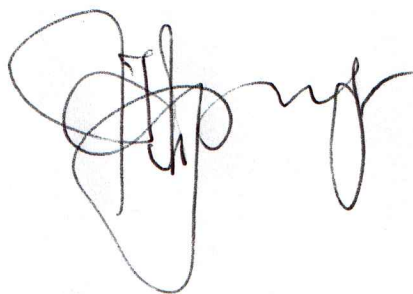
проти – 0 (немає)

утримались – 0 (немає)

Керівник семінару

Академік НАН України,

доктор фіз.-мат. наук



І. М. Мриглюд

Секретар семінару

наукова співробітниця,

кандидат фіз.-мат. наук



О. А. Добуш