

## РЕЦЕНЗІЯ

на дисертацію Володимира Гордійчука  
«Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до  
м'яких сфер з короткосяжним притяганням»

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

Дисертаційна робота присвячена розробці нової версії базисної системи у статистичній теорії рідкого стану речовини, яка могла б замінити класичну базисну систему, якою на даний час є модель пружних сфер/м'яких сфер з короткосяжним відштовхуванням. Тому, важливою вимогою до такої нової базисної системи є можливість її теоретичного трактування та аналітичного опису, подібно до того, як це є у випадку пружних сфер. Це останнє, дозволило б використовувати цю базисну систему, наприклад, в методі теорії збурень для побудови мікроскопічної молекулярної теорії простих, неасоціативних плинів у широкому діапазоні термодинамічних параметрів. Дисертація складається зі вступу, трьох розділів основного тексту, висновків, додатків та списку використаних джерел, загальний обсяг становить 107 сторінок.

### *Структура і зміст дисертаційної роботи*

У Вступі обґрунтовано актуальність досліджуваних задач дисертаційної роботи та сформульовано мету і завдання роботи, визначено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, наведений особистий внесок здобувача та стисло характеристику дисертаційної роботи.

У першому розділі проведено огляд літератури за тематикою становлення та використання концепції базисної системи у статистичній теорії плинів, починаючи з роботи Ван-дер-Ваальса та термодинамічної теорії збурень Цванціга. Особливу увагу звернено на використання в теорії збурень базисної системи пружних сфер та на розділення повної парної міжчастинкової взаємодії на дві частини - одна з яких відповідає за відштовхування, а інша за притягання. Показано переваги та недоліки такого підходу до розділення взаємодій. Наведено обмеження, які виникають при використанні базисної системи тільки з відштовхувальними взаємодіями.

У **другому** розділі наведено результати дослідження окремих аспектів колективної динаміки плинину пружних сфер і зокрема, негідродинамічних колективних збуджень, які виникають в такому плинні. Окрім усього іншого, такі дослідження зумовлені фактом, що на противагу добре дослідженим термодинамічним властивостям плинину пружних сфер, який інтенсивно використовується як базисна система при описі реалістичних плинів, колективна динаміка пружних сфер не є так добре дослідженою. Проведене порівняння отриманих результатів для плинину пружних сфер з такими ж для плинину з м'яким короткосяжним відштовхуванням в окремих випадках демонструє принципову відмінність між ними. Зокрема, з огляду на густинну залежність відношення питомих теплоємностей (зростаюча функція у випадку пружних сфер, і спадаюча функція у випадку м'яких сфер та простих плинів, в цілому) та на негативне (пружні сфери) та позитивне (м'які сфери та прості плинні, в цілому) відхилення від лінійного гідродинамічного закону дисперсії зі збільшенням хвильового числа.

**Третій** розділ присвячений базисній системі з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням. На початку запропоновано функціональну форму парного

потенціалу базисної системи з короткосяжним притяганням. В основі такої базисної системи є WCA-подібне Ленард-Джонсівське короткосяжне відштовхування, яке на умовах неперервності доповнено швидко загасаючим короткосяжним притяганням у вигляді суми двох юкавівських експонент. Базисну систему досліджено методами МС та МД.

За матеріалами дисертації опубліковано 8 наукових праць, з них: 2 статті у фахових наукових виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science.

### ***Зауваження до дисертації***

#### *Загальні зауваження*

- 1) Ще до робіт Званціга в 1954 році теорія збурень була використана в роботах Longuet-Higgins за 1951 рік, Proc. R. Soc. London, 1951, A205, 247. Необхідно додати відповідне цитування.
- 2) *“Єдиним методом статистичної механіки, що дозволяє отримувати результати термодинаміки (наприклад, рівняння стану тощо) в аналітичній формі, що стосується реальних рідин, є термодинамічна теорія збурень”* на сторінці 14. Я не згоден з цим твердженням. Є багато інших методів які дозволяють отримати аналітичні результати, наприклад теорія масштабованої частинки, інтегральні рівняння etc.
- 3) *“Об’єктом дослідження є термодинамічні властивості реальних простих плинів з парною міжчастинковою взаємодією Ленарда-Джонса.”* на сторінці 16. Думаю система твердих сфер теж є об’єктом досліджень.
- 4) Я не дуже розумію значимості зробленого спостереження, що  $C_v$  системи твердих сфер виявилось рівним  $C_v$  ідеального газу. Внутрішня енергія обох систем, на відміну від ентальпії, є однаковою. Відповідно, чому похідна по температурі від цієї енергії повинна відрізнитись? Тут добре було б додати пояснюючий коментар. Знову ж таки, це на відміну від ентальпії, чия похідна дає  $C_p$ , і яка є відмінною в двох системах. Зрештою  $C_p$  можна облічити з рівняння стану і порівняти зі значенням  $C_p/C_v$  отриманим шляхом підгонки в симуляціях.

#### *Незначні помилки*

- 1) У формулі 1.9  $g_0(r, \lambda)$  необхідно замінити на  $g_0(r)$
- 2) Прізвище Verlet читається як Верле а не Верлет.
- 3) На Рис. 3.9. є дві панелі. Підпис подано лише для однієї з них.
- 4) Термін пружні сфери вживається поряд з терміном тверді сфери. Бажано вибрати лише один, щоб не створювати непотрібної плутанини.

- 5) Побаження: застосувати теорію збурень до системи LJ і оцінити якість запронованої системи відліку для рівняння стану.

***Висновок щодо відповідності дисертації нормам***

Дисертація Володимира Гордійчука на тему «Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням» подана на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» є завершеним дослідженням, яке розглядає актуальну проблему теоретичної фізики. Я вважаю, що вона цілком задовольняє вимоги порядку присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №44 від 12 січня 2022 року з внесеними змінами згідно постанови Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року, а її автор — Володимир Гордійчук заслуговує присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю (104 - фізика та астрономія; 10 - природничі науки).

Рецензент:



м.Львів,

15 Січня 2024 р.

Провідний науковий співробітник відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України  
доктор фіз.-мат. наук А.Б. Баумкетнер