

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».

Незважаючи на те, що дослідження термодинамічних, структурних та динамічних властивостей неасоціативних плинів, які моделюються жорсткими або напівжорсткими сферами та враховують ефекти виключеного об'єму, мають досить довгу історію (яка сягає ще піонерських робіт Ван-дер-Ваальса) та значні здобутки, серед наукової спільноти тривають спроби побудови ефективних теорій, які дозволяють враховувати сингулярний характер міжчастинкових взаємодій. Одним із викликів є вдосконалення існуючих підходів щодо вибору базисної системи твердосферних плинів, що дозволяє розділити короткосяжну взаємодію та врахувати далекосяжні сили когезивної природи. Інші, не менш актуальні задачі, стосуються вивчення динамічних характеристик таких систем як на основі теоретичних методів, так і комп'ютерного експерименту: дослідження спектрів колективних збуджень, можливих взаємозв'язків між поперечною та поздовжньою динамікою рідини у широкій області хвильових векторів і частот, тощо. На пошук відповідей на ці та інші питання і зорієнтована ця дисертаційна робота.

Структура і зміст

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

У першому розділі проведено огляд літератури за тематикою становлення та використання концепції базисної системи в 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 плинну жорстких сфер. Серед основних цікавих результатів слід відзначити нехарактерну залежність відношення питомих теплоємностей $\gamma = C_p/C_v$ від густини системи ρ , яка зростає зі збільшенням ρ (або відповідного параметра упаковки η) на протипагу цілком іншій залежності $\gamma(\eta)$, характерній для простих плиннів із міжчастинковою взаємодією типу Леннарда-Джонса. Отримані результати (в т.ч. дані Рис. 2.6) свідчать про значне посилення зв'язку між в'язкими та тепловими процесами в системі.

Специфіка міжчастинкових взаємодій знайшла своє відображення і у вигляді часових кореляційних функцій поперечних складових потоків імпульсу, що проявляється в появі достатньо помітного мінімуму при щільній упаковці $\eta = 0.47$. Іншим напрочуд цікавим явищем є поява в системі поперечних хвиль на фоні поздовжніх (починаючи з $\eta = 0.395$) із двома «пропагаторними щілинами» в околі хвильових чисел $k=1$ та 6. Слід зауважити, що права щілина зникає при найбільшій з досліджуваних упаковок, $\eta = 0.47$, що свідчить про можливість формування поперечних хвиль з довжинами порядку міжчастинкових відстаней. Також слід відзначити чітко виражену від'ємну дисперсію поздовжніх колективних збуджень, яка є притаманна плинам жорстких сфер і цілком відрізняється від додатньої дисперсії звуку, яка спостерігається в простих рідинах з м'яким міжчастинковим потенціалом.

Третій розділ присвячений базисній системі з м'яким відштовхуванням та короткосяжним притяганням. Своєрідним авторським «ноу-хау» є вдосконалення вибору базисної системи, коли, на відміну від існуючих підходів, до сингулярного потенціалу твердих сфер додається короткосяжна притягальна взаємодія на відстанях порядку першої координаційної сфери. Здобувачем детально проаналізовано переваги запропонованого підходу, зокрема на фазовій діаграмі «рідина-газ», та на радіальних функціях розподілу. Показано, що радіальна функція розподілу запропонованої базисної системи достатньо добре відтворює першу координаційну сферу LJ плинну в широкому діапазоні термодинамічних станів, включно з діапазоном малих густин та низьких температур. Розраховано три перших віріальних коефіцієнти базисної системи з короткосяжним притяганням і показано їх якісну подібність до відповідних віріальних коефіцієнтів вихідного плинну Леннарда-Джонса.

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

Однак, я змушений зауважити, що текст дисертаційної роботи містить дуже багато орфографічних та стилістичних помилок; деякі місця мають явні ознаки некваліфікованого машинного перекладу з англійської мови, якою написані наукові статті, на українську. Не надто охайно та місцями без належних підписів підготовлені графічні матеріали в Додатках. Складається враження, що здобувач не зробив навіть мінімальної вчитки тексту дисертаційної роботи, яка місцями виглядає радше як чернетка, а не завершена кваліфікаційна робота. Усе це значно ускладнює читання дисертації та дуже псує загалом позитивне враження від її наукової частини.

Якщо ж зосередитися на спробі більш детального розуміння наукової складової, дозволю собі сформулювати наступні

Запитання та зауваження

1. На стор. 40 стверджується, що *пряме застосування методології GCM до речовин із твердою серцевиною, якими і є розглядувана система твердими сферами, є дуже складним через неаналітичну форму потенціалу взаємодії*. Чи можна стверджувати, що це є настільки вагомою обставиною, щоб дисперсійну криву будувати виключно на основі аналізу максимумів відповідних спектральних функцій, а не власних значень узагальненої гідродинамічної матриці, як це робиться у методі *GCM* і є значно точнішим при дослідженні спектрів колективних збуджень?
2. Відомо, що крім вищих (за хвильовим числом k) внесків у дисперсію, які, як справедливо зауважено в дисертації, можуть бути як додатними, так і від'ємними, існує позитивний внесок $\sim k^{5/2}$, який для простих рідин можна розрахувати в рамках теорії взаємодіючих мод (*mode coupling theory*). Що можна сказати про величину таких неаналітичних поправок у випадку рідин, коли молекули моделюються жорсткими сферами з далекосяжною притягальною взаємодією?
3. На Рис. 2.5 автор згадує частоту Френкеля, яка лежить в околі «ротонного мінімуму» відповідних дисперсійних кривих. Хотілося б отримати деякі пояснення фізичного змісту цієї частоти.
4. В області «ротонного мінімуму» (як і в області відповідного максимуму) групова швидкість поздовжних колективних збуджень $d\omega(k)/dk$ стає рівною нулю. Зазвичай це пояснюється сповільненням поширення утворених хвильових пакетів (груп хвиль) на мікроскопічних відстанях $\sim 1/k_{min}$. Яке пояснення природи таких процесів міг би дати автор у даному випадку, адже як і фазова $v_{\phi}=\omega(k)/k$, так і групова $v_{gp}=d\omega(k)/dk$ швидкості при великих k мають радше узагальнений зміст.

5. Рис. 2.5 демонструє дуже цікаве явище: поперечні хвилі в рідині твердих сфер зникають в околі $k \geq 6$ аж до випадку найвищої густини, яка розглядалася в роботі. Бажано мати пояснення автора з цього приводу.
6. Значення часової кореляційної функції «ентальпія-ентальпія» $F_{hh}(k \rightarrow 0, t=0)$, зображеної на Рис. 2.7, пов'язане з відповідною статичною кореляційною функцією (СКФ), що визначає питому теплоємність при фіксованому об'ємі C_v . Не зовсім зрозуміло, як з поведінки цієї СКФ при мінімальному значенні хвильового вектора k_{min} можна судити про зв'язок між колективними збудженнями та теплоємністю C_v у ширшому діапазоні хвильових чисел. Про це стверджується в останньому абзаці підрозділу 2.4.
7. Чи має параметр κ у виразі (3.5) для потенціалу короткосяжного притягання зміст оберненого радіусу першої координаційної сфери? З подальшого обговорення в тексті дисертації такий висновок напрошується.

Висновок щодо відповідності дисертації нормам

Незважаючи на недоліки, про які йшлося на попередній сторінці, можна стверджувати, що отримані наукові результати не викликають сумнівів чи заперечень, є викладеними стисло та зрозуміло. Вважаю, що 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. Робота задовольняє основні вимоги щодо 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

к.ф.-м.н. Ігнатюк В.В.

старший науковий співробітник
Інституту фізики конденсованих систем
Національної академії наук України