

ВІДГУК  
офіційного опонента  
на дисертаційну роботу ШМОТОЛОХИ Володимира Ігоровича  
«Вплив пористих середовищ на термодинамічні властивості та фазову  
поведінку анізотропних плинів»,  
подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук  
за спеціальністю 01.04.24 – фізики колоїдних систем

Останнім часом задачі, пов’язані з анізотропними плинами, викликають особливий інтерес через унікальність їх термодинамічних, структурних, оптичних та інших властивостей. Анізотропні плини є невід’ємною складовою і ключовими елементами багатьох технологічних процесів. Тому питання вивчення і передбачення властивостей анізотропних молекулярних плинів знаходяться у центрі уваги дослідників. В анізотропних системах очікується багата фазова поведінка, оскільки можливі різні способи впорядкування частинок несферичної форми. Це може бути як за рахунок форми частинок, так і за рахунок анізотропії притягальної взаємодії. Однак зростанню сфер застосування таких матеріалів перешкоджає саме їх агрегатний стан. Ця проблема вирішується шляхом впровадження анізотропних плинів в тверді субстанції, такі як полімери чи інші пористі матеріали. Це викликає необхідність побудови теорії, яка давала б загальний опис системи «анізотропний плин – пористе середовище». Саме таким дослідженням і є дисертація В.І.Шмотолохи, присвячена опису термодинамічних властивостей анізотропних плинів в об’ємі та пористому середовищі. В рамках цієї дисертації отримані нові ефекти, такі як вплив форми частинок матриці, пористості матричних частинок на фазову поведінку анізотропних плинів, зокрема ізотропно нематичний фазовий перехід. Досліджено виникнення нематично-нематичного фазового переходу і вплив пористого середовища на його поведінку.

Актуальність таких досліджень полягає у забезпеченні та поглибленні розуміння на молекулярному рівні фазової поведінки між фазами широкого кола нематогенних систем як в об’ємі, так і в пористому середовищі. Ці дослідження є також важливими для практичних застосувань при вдосконаленні існуючих і розробці нових методик

досліджень в медицині, колоїдній хімії та біофізиці. Не викликає сумніву також і відповідність дисертації спеціальності 01.04.14 – фізики колоїдних систем.

У вступній частині дисертації (анотація, вступ) дисертант чітко обґруntовує актуальність теми дослідження, формулює мету і задачі дослідження, висвітлює основні результати, новизну та науково-практичне значення роботи.

У першому розділі дисертаційної роботи дано детальний аналіз сучасного стану теоретичних досліджень термодинамічних властивостей і фазових станів анізотропних плинів. Роботу присвячено детальному огляду моделей анізотропних плинів, моделей сферичних плинів в пористих матеріалах, представлених в літературі, а також методів їх дослідження, зокрема метод масштабної частинки.

У другому розділі дисертації представлено оригінальні результати дослідження ізотропних плинів у пористих середовищах. В їх основі лежить розвиток та застосування теорії масштабної частинки (ТМЧ) для опису плинів твердих опуклих тіл, що знаходяться в невпорядкованому пористому середовищі. В розділі розроблено формалізм, який забезпечує опис систем відліку для різноманітних плинів несферичної форми. Знайти термодинаміку таких систем розробленим формалізмом можна, знаючи об'єм, площину поверхні і середню кривизну частинки. Важливим результатом є можливість вже на цьому етапі врахувати несферичність частинок. Наступним кроком було використання в якості системи відліку в рамках теорії збурень результатів, отриманих в першій частині даного розділу. В розділі запропоновано розвинення теорії масштабної частинки в наближенні Ван дер Ваальса для опису простого плину із притягальною взаємодією в невпорядкованому пористому середовищі. Для кількісного покращення результатів опису термодинаміки простого плину та фазової діаграми газ-рідина теорія масштабної частинки була поєднана із наближенням Баркера-Гендерсона.

В третьому розділі розглянуто тверді сфeroциліндричні частинки у невпорядкованому пористому середовищі. На основі отриманого рівняння проведено дослідження ізотропно-нематичної фазової поведінки молекулярних систем в залежності від анізометрії молекул та пористості пористого середовища. Знайдено області співіснування нематичної та ізотропної фаз твердого сфeroциліндричного плину в твердосферній матриці для різних параметрів моделі. Застосовано корекції результатів методами Карнагана-Старлінга та Парсонса-Лі. Проведено порівняння впливу невпорядкованих пористих середовищ на властивості сфeroциліндричних плинів у порівнянні з відповідними даними комп'ютерного моделювання.

Особливу увагу викликає четвертий розділ, в якому приведено узагальнення порівняння Ван дер Ваальса на анізотропні плини в невпорядкованих пористих середовищах. Наявність пористого середовища впливає на фазові діаграми, зокрема критична точка зміщується в бік нижчих температур та менших густин. Досліджено систему сфераціліндричних частинок із досить великими значеннями видовженості, для яких фазовий перехід між ізотропною і нематичною фазами знаходиться в області доволі малих густин. Завдяки цьому відповідний фазовий перехід газ-рідина розташований повністю в нематичній області і може розглядатися як фазовий перехід типу нематик-нематик. Показано, що фазова діаграма плину за таких умов дуже чутлива до типу притягальної взаємодії між частинками. Розроблена теорія співставлена з наявними експериментальними даними для рідкокристалічних станів поліпептидів у деметилформаміді за наявності пористого середовища.

Висновки дисертаційної роботи підсумовують отримані в роботі оригінальні результати.

Достовірність отриманих результатів та висновків роботи не викликає жодних сумнівів. Підставою для такого твердження є те, що отримані в дисертації результати порівняні з комп'ютерними симуляціями а також з експериментальними даними для поліпептидів у деметилформаміді і є в добром узгодженні. Наукова новизна роботи: низку важливих результатів було отримано вперше – від розвинення теорії масштабної частинки для несферичних частинок до розвинутого автором теоретичного опису анізотропних плинів у просторово обмежених середовищах. Узагальнено методи розрахунку трифазної рівноваги газ-рідина-нематик, а також рівноваги нематик1-нематик2 в рамках узагальненого наближення Ван дер Ваальса. Досліджено фазову поведінку сильно видовжених сфераціліндричних частинок в невпорядкованому пористому середовищі з притягальною взаємодією типу Ленард-Джонса і анізотропною потенціальною ямою, проведено порівняння отриманих даних теорії з експериментом для поліпептидів у диметилформаміді.

Представлена робота виконана на високому науковому рівні. Результати досліджень даної роботи опубліковано в 6 публікаціях у фахових виданнях, що входять до Scopus та Web of Science. Результати роботи неодноразово обговорювалися на наукових конференціях в Україні та закордоном.

Поряд з тим слід зазначити:

1. В оглядовій частині багато уваги приділено теорії масштабної частинки, анізотропним плинам, але недостатньо узагальнено рівняння Ван дер Ваальса.

2. У другому розділі аналізується вплив різних розмірів матричних частинок по відношенню до розмірів частинок плину. Поряд з тим в інших розділах немає такого розгорнутого аналізу співвідношень розмірів частинок плину до матричних частинок. Також у четвертому розділі немає порівнянь теорії з даними комп'ютерних симулляцій.

3. В дисертаційній роботі розглядаються плини, які містяться у пористих середовищах із невпорядкованою (випадковою) структурою, у яких пори сформовані хаотично розподіленими твердими частинками. Форми і розміри пор не чітко визначені, вони не ізольовані і будують мережу з дуже складною топологією. Пористе середовище представлена як заморожена конфігурація випадково розподілених частинок, що утворюють матрицю. В цьому контексті було б цікаво порівняти результати, отримані в роботі з результатами для бінарної суміші, для молекул плину і частинок, які, як і молекули плину, рухливі і можуть також впорядковуватися.

Ці зауваження, безумовно, не є істотними і не знижують загальну високу оцінку роботи.

Дисертація В.І.Шмотолохи виконана на високому науковому рівні, низку важливих результатів отримано вперше. Результати роботи можуть бути використані у наукових установах як фундаментального, так і практичного профілю.

Практичне значення дисертації полягає, зокрема, в тому, що за допомогою отриманих результатів можна описати фазову поведінку ряду конкретних фізичних систем. Матеріали дисертації містять багато цікавих корисних результатів, що знайшли своє застосування у роботах інших дослідників. У роботі є теоретичне підґрунтя для створення і вдосконалення нових матеріалів на основі анізотропних плинів в пористих середовищах для медико-біологічних застосувань.

Дисертація Шмотолохи В.І. «Вплив пористих середовищ на термодинамічні властивості та фазову поведінку анізотропних плинів», подана на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук, повністю відповідає паспорту спеціальності 01.04.24 – фізики колоїдних систем. Вона є завершеною самостійною науково-дослідною роботою, в якій вперше отримані нові науково обґрунтовані результати, які в сукупності вирішують конкретну важливу і актуальну задачу сучасної фізики колоїдних систем – розвиток теоретичних методів для опису термодинамічних властивостей анізотропних просторово обмежених плинів.

Автореферат адекватно відображає зміст дисертації. Ознак плагіату не виявлено. Дисертація повністю задовольняє вимогам Порядку присудження наукових ступенів, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 р. № 567, які висуваються до кандидатських дисертацій, а її автор – Шмотолоха Володимир Ігорович – безумовно, заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.24 – фізика колоїдних систем.

Офіційний опонент

доктор технічних наук,

професор,

професор кафедри «Програмного забезпечення»

«Львівської політехніки»

А. В. Фечан

Підпис проф. Фечана А.В. ЗАСВІДЧУЮ:

Вчений секретар Національного університету

"Львівська політехніка"

Брилинський Р.Б.

