

Голові разової спеціалізованої вченої ради
Одеського національного університету
імені І. І. Мечникова
доктору фізико-математичних наук, професору,
завідувачу кафедри фізики та астрономії
факультету математики, фізики
та інформаційних технологій
Гоцунському Володимирі Яковичу

РЕЦЕНЗІЯ

рецензента Гаврюшенка Дмитра Анатолійовича на дисертаційну роботу Катца Андрія Михайловича «Глобальний ізоморфізм Юкавівських флюїдів та моделі Ізінга», поданої на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія

У дисертаційній роботі Катца А.М. розглядаються актуальні питання, що стосуються дослідження рівноваги рідина-пара флюїдів із міжчастинковою взаємодією притягнення юкавівського типу з жорстким ядром та його узагальнень у системах з розмірністю 2 та 3 на основі підходу глобального ізоморфізму.

I. Актуальність теми дисертаційної роботи

Актуальність роботи Катца А.М. обумовлена тим, що в сучасній теорії рідкого стану залишаються емпіричні факти і закономірності, а саме: закон прямолінійного діаметру при переході рідина-пара і прямолінійність Зено-лінії, які на даний час все ще не мають загально прийнятого пояснення. Важливим є те, що ці закономірності справедливі для речовин, які не підпорядковані принципу відповідних станів, що вказує на існування більш широких класів термодинамічної подібності, ніж вже відомі. У зв'язку з цим на перший план виходить пошук і пояснення цих універсальних закономірностей для різних класів речовин, зокрема узагальнення принципу відповідних станів із застосуванням ідей глобального ізоморфізму, який встановлює відповідність між кривою співіснування рідина-пара і рішенням моделі

Ізінга для ґратчастого газу для рідини. Якщо в описі простих рідин і газів вдалося досягти деяких успіхів, то опис властивостей і фазових перетворень в таких рідинних системах як асоціативні рідини, плазма, розчини молекул протеїнів та іонні рідини, на сьогоднішній день залишається проблематичним.

Теоретичні дослідження цих рідинних систем пов'язане з рядом труднощів, зокрема їхня термодинамічна поведінка не описується класичним принципом відповідних станів, не можуть бути описані простими степеневими потенціалами типу Леннарда-Джонса. Для цих систем потенціал взаємодії вже не є двопараметричним, і сам може бути функцією стану. Один з існуючих способів опису таких систем – це використання потенціалу Юкави з жорстким ядром (НСАУ).

Успіхи підходу глобального ізоморфізму для рідин, взаємодія між частинками яких може бути описана модельним потенціалом Леннарда-Джонса, є наслідком однорідності притягувальної частини потенціалу взаємодії, що не виконується для потенціалу Юкави. Застосування зазначеного підходу для потенціалу Юкави обмежене значеннями - величини ефективного радіусу взаємодії, де ще існує стійка двофазова область.

Запропоноване автором застосування підходу глобального ізоморфізму для рідинних систем різної розмірності, із міжчастинковою взаємодією притягнення юкавівського типу з жорстким ядром обумовлює як *актуальність*, так і *практичну цінність* дисертаційної роботи Катца А.М.

II. Загальні відомості про структуру дисертації

Дисертація має структуру завершеної науково-дослідної роботи. Рукопис викладено на 113 сторінках, і він повністю відповідає вимогам щодо оформлення дисертацій. Текст дисертації складається з анотації, вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних літературних джерел з 79 найменувань та двох додатків. Робота містить 47 рисунків та 11 таблиць.

III. Коротка характеристика змісту роботи

У *вступі* обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету і завдання дослідження, обґрунтовано: наукову новизну,

теоретичну і практичну цінність одержаних результатів, визначено особистий внесок здобувача. Наведено інформацію щодо апробації, структури і обсягу дисертації.

У першому розділі наведено результати аналізу літературних джерел щодо принципу відповідних станів та основних ідей глобального ізоморфізму, розглядаються особливості Зено-лінії та Зено-елементу для систем з різними термічними рівняннями стану. Автором зацентовано увагу на концепції рідинно-газового трикутника, побудованого на параметрах Бойля, який може розглядатися для узагальнення наявних даних для кривих співіснування реальних та модельних систем. Крім того, розглядаються основні співвідношення між кривими співіснування дискретної моделі ґратчастого газу (моделі Ізінга) та континуального флюїду, побудовані на основі проєктивного перетворення. Показано, що проєктивне перетворення будується на основі параметрів Зено-елементу, що за визначенням є дотичною лінією до рідинної гілки бінодалі. Далі розглядається можливе наближення для прямої кореляційної функції, що з врахуванням співвідношень глобального ізоморфізму, дає можливість отримати рівняння відносно параметру проєктивного перетворення .

У другому розділі розвинуто застосування підходу глобального ізоморфізму до юкавівських флюїдів, розглянуто особливості НСАУФ при послабленні притягання між частинками. Дисертантом показано, що у випадку достатньо слабкої взаємодії неможливе існування стабільної рідкої фази. Проведена автором симетризація даних бінодалі вказує на можливість описання симетризованих даних за допомогою бінодалі ґратчастого газу. Дисертантом проведено порівняння отриманих різними методами віріальних коефіцієнтів для потенціалу НСАУ з наявними даними дозволило, доведено, що поведінка рідинно-газового трикутника, побудованого з використанням Зено-елемента, може використовуватись для передбачення зникнення стабільної рідкої фази. Крім того, автором розраховано параметри критичної точки НСАУФ.

У третьому розділі розглянуто застосування описаних у другому розділі результатів для опису термодинамічної поведінки таких двовимірних систем, як мономолекулярні плівки. Зокрема, автором продемонстровано можливість побудови опису наявних даних симуляції поведінки юкавівських флюїдів за

допомогою бінодалі гратчастого газу, до якої застосовано проективне перетворення. Проведено порівняння поведінки параметрів Зено-елементу та віріальної Зено-лінії для юкавівських флюїдів. Автором на основі аналізу поведінки параметрів Зено-елементу описано зникнення стабільності рідкої фази у двовимірних системах при слабкому притяганні між частинками. Дисертантом знайдено залежності критичної температури та критичної густини від параметру потенціалу (оберненої довжини екранування) та проведено порівняння отриманих результатів наявними даними комп'ютерного моделювання двовимірних плівок з Юкавівським типом взаємодії.

Висновки містять основні результати роботи.

У додатку наведено перелік наукових праць автора та список конференцій, на яких було представлено науковий здобуток дисертанта.

IV. Наукова новизна отриманих результатів

У дисертаційній роботі дисертантом вперше застосовано підхід глобального ізоморфізму до розгляду термодинамічної поведінки дво- та тривимірних НСАУФ; показано, що параметри Зено-елемента є більш адекватними концепціїї рідинно-газового трикутника на відміну від загально вживаних параметрів віріальної ZL; знайдено квантові поправки до параметрів Зено-елементу, що дозволило показати, що квантова взаємодія призводить до симетризації бінодалі; вперше запропоновано самоузгоджене рівняння для параметру проективного перетворення глобального ізоморфізму.

V. Практичне значення отриманих результатів

Результати, отримані в роботі, дозволяють передбачати критичні властивості рідинних систем із потенціалом міжмолекулярної взаємодії Юкави, досліджувати границі стійкості рідинної фази на основі інформації про фазову діаграму гратчастого газу, залежність параметрів Зено-елементу від довжини екранування НСАУ. Встановлений простий зв'язок між критичними параметрами 2- та 3-вимірною флюїду дає можливість отримання параметрів критичних точок для мономолекулярних шарів на підложках, опираючись на дані про параметри критичної точки рідини в об'ємній фазі.

VI. Апробація результатів та повнота викладення в опублікованих працях

За результатами дисертаційного дослідження опубліковано 6 наукових праць, з них 3 статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Scopus, та 3 тез доповідей конференцій. Усі основні результати дисертаційної роботи є новими та вчасно опубліковані у наукових виданнях.

VII. Особистий внесок здобувача

Полягає в аналізі літературних джерел, виконанні основного обсягу теоретичних досліджень, обробці та аналізі отриманих даних та написанні статей і дисертації, зокрема в: дослідженні сингулярної поведінки параметра густини, та отриманні аналітичного виразу для параметру проєктивного перетворення; проведенні розрахунку залежності критичних параметрів юкавівської рідини від параметру екранування юкавівського потенціалу; проведенні розрахунку внесків від квантових ефектів бозе-статистики до параметрів Зено-елементу в рамках теорії збурень.

VIII. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів

Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій, сформульованих у дисертації, підтверджено виконанням досліджень з використанням сучасних ефективних методик і адекватних моделей, коректністю фізичних припущень та позитивним досвідом апробації результатів дисертаційної роботи. Достовірність теоретичних результатів та результатів чисельних розрахунків підтверджено порівнянням їх з даними інших авторів.

Сформульовані в дисертаційній роботі *наукові положення, висновки та узагальнення* ґрунтуються на суттєвому обсязі теоретичного матеріалу. Зроблені автором висновки цілком обґрунтовані та відповідають поставленій меті роботи та її змісту. Результати дисертаційної роботи відповідають змісту статей, що надруковані у фахових журналах.

IX. Зауваження та побажання

Разом із загальною позитивною оцінкою роботи, дисертація не позбавлена

деяких недоліків:

1. Для більшості наведених у тексті дисертації даних не вказано похибки симуляції та розрахунків.
2. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів, а також їх практичне значення можна покращити, провівши більш ретельне порівняння параметрів 2D та 3D рідинних систем.
3. Розрахунки в моделі ґратчастого флюїду виконано для квадратної (кубічної) ґратки. Бажаним було б провести обчислення для інших типів ґратки. Великий інтерес становить також врахування неоднорідностей в об'ємі та на поверхні ґратки.
4. Припущення на сторінці 68 про експоненційне спадання потенціалу не є обґрунтованим. Автор обґрунтував «швидке» спадання значення потенціалу із зростанням відстані між частинкам.
5. У дисертації наявні деякі похибки редакційного та стилістичного характеру.

Наприклад:

- у формулах (2.2) – (2.7) та багатьох інших r – розмірна величина, а у формулі (2.8) – вже безрозмірна. Тим не менш, на сторінці 62 проводиться порівняння значень величини r з одиницею;
- в тексті зустрічається велика кількість наукових жаргонізмів, таких як «короткий потенціал Юкави», «обчислення фазової рівноваги», «теплова довжина хвилі де Бройля» тощо;
- у тексті зустрічається як відомий голландський вчений ван дер Ваальс (підпис до рис. 1.1), так і ван-дер-Ваальс;
- вираз (1.28) отримано у наближенні (1.27) «поза критичною точкою» (стор. 41), а прямиий наслідок з нього – вираз (1.29) – записано саме для критичної точки;
- на сторінці 45 не зрозуміло, що саме позначено через Λ – параметр де Бюра чи середнє значення довжини хвилі де Бройля хаотичного теплового руху частинок газу. Якщо останнє, то вираз не є точним.

Зроблені зауваження не зменшують цінності основних наукових положень, висновків і рекомендацій, які виносяться на захист дисертантом. Крім того, вказані

недоліки в основному мають характер побажань для подальшої роботи і не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи Катца А.М.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Катца Андрія Михайловича «Глобальний ізоморфізм Юкавівських флюїдів та моделі Ізінга» є завершеним і самостійним науковим дослідженням, яке за актуальністю теми, її новизною та обґрунтованістю наукових результатів, що мають теоретичне та практичне значення, відповідає вимогам до наукової кваліфікації ступеня доктора філософії, що встановлені «Порядком присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою № 44 Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року, а Катц Андрій Михайлович заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії у галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 104 Фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

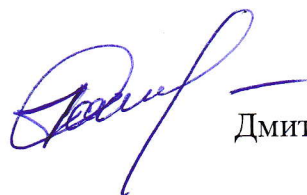
доктор фізико-математичних наук, професор,

завідувач кафедри молекулярної фізики

фізичного факультету

Київського національного університету

імені Тараса Шевченка



Дмитро ГАВРЮШЕНКО

Ліцензія засвідчена
Кабінетом Міністрів України
06.12.2023р.

