

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертацію

Катца Андрія Михайловича

«Глобальний ізоморфізм Юкавівських флюїдів та моделі Ізінга»

подану на здобуття ступеня доктора філософії

за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

Дисертаційна робота Катца Андрія Михайловича присвячена поширенню підходу Глобального ізоморфізму на флюїди з юкавівським типом взаємодії. Глобальний ізоморфізм встановлює однозначну відповідність між станами ґраткового газу та континуального флюїду. В роботі показано, що відповідність між характеристичними елементами фазових діаграм рідина-пара може бути реалізована за допомогою проєктивного перетворення. Даний метод був вперше застосований для опису юкавівських флюїдів, які зокрема цікаві тим, що рідка фаза втрачає стійкість при зменшенні радіусу взаємодії потенціалу. Враховуючи дану особливість у роботі вказано межі застосування підходу, що базується на виродженні рідинно-газового трикутника.

Актуальність дослідження термодинамічних властивостей систем у рівновазі визначається складністю їх повного теоретичного опису, особливо для систем, де неможливо досягти точності без розв'язання квантово-механічних рівнянь та знаходження міжчастинкового потенціалу взаємодії. Наближені методи, зокрема Глобальний ізоморфізм, є ефективними для пошуку універсальних закономірностей, але застосування їх до складних систем, що описуються потенціалом Юкави, потребує розвитку машинного експерименту та обґрунтування спостережуваних закономірностей. Попередні результати застосування Глобального ізоморфізму для простих рідин з леннард-джонсівською взаємодією (LJ - fluids) свідчать про його ефективність, тому природними є спроби поширення цього ж підходу на юкавівські флюїди (HCAF – Hard Core Attractive Yukawa Fluids).

Робота складається зі вступу та трьох розділів, до кожного з яких наведено висновки. Наприкінці дисертація містить перелік найважливіших результатів роботи винесених на захист. Список джерел складається з 83 найменувань.

Перший розділ присвячено загальному опису ідей та концепцій, що застосовані у роботі. Головна увага приділена опису підходу Глобального ізоморфізму. Показана можливість оцінки положення критичної точки флюїдів з використанням проективного перетворення та рівняння, що пов'язує критичну температуру та густину через пряму кореляційну функцію. Хоча для прямої кореляційної функції обрано вигляд функції Майєра (наближення розріджених газів), з урахуванням проективного перетворення, автору вдалося отримати непогану відповідність при застосуванні цього рівняння у подальшому. Окрім цього показано, що побудова дотичної до рідкої гілки бінодалі на основі параметрів Зено-елементу дає змогу відтворити вплив тотожності частинок на вигляд кривої співіснування (квантові ефекти збільшують симетрію бінодалі). Цей результат також впливає з суто фізичних міркувань, що підтверджує адекватність використаного підходу.

У другому розділі досліджено застосування Глобального ізоморфізму до юкавівських флюїдів, зокрема, вивчено вплив послаблення притягувальної частини потенціалу в системах НСАУФ. Показано, що при надто слабкій взаємодії виникає неможливість існування стабільної рідкої фази. Симетризація даних бінодалі вказує на можливість опису симетризованих даних за допомогою бінодалі ґраткового газу. Результати розрахунку виріальних коефіцієнтів та аналіз рідинно-газового трикутника підтверджують можливість розглядати поведінку параметрів Зено-елементу як певного маркера зникнення стабільної рідкої фази у системах НСАУФ. Окрім цього знайдені теоретичні залежності критичних точок $T_c(\lambda)$, $\rho_c(\lambda)$.

У третьому розділі розглядається узагальнення отриманих результатів на двовимірні системи, а саме, на мономолекулярні плівки юкавівських та леннард-джонсівських флюїдів. Автор виявив, що комп'ютерні симуляції цих систем успішно апроксимуються за допомогою бінодалі ґраткового газу з

використанням проективного перетворення. Проведено порівняння характеристик Зено-елементу та віріальної Зено лінії для юкавівських флюїдів. Важливим результатом є виявлення втрати стабільності рідкої фази у двовимірних системах при слабкому притяганні, і це було кількісно описано на основі параметрів Зено-елементу. Розглянуто вплив м'якого ядра на цей процес та визначено залежності критичних точок від параметрів екранування потенціалу. Подано результати, що вказують на можливість узагальнення критичних точок об'ємної та поверхневої рідин в рамках розглянутого підходу.

На мій погляд, в дисертаційній роботі відсутні суттєві недоліки, і в мене є лише декілька зауважень або побажань до її автора:

1. Разом з точним розв'язком Онзагера для двовимірної моделі Ізінга або відомими даними числових симуляцій для тривимірних моделей автор інколи також використовує порівняння з розв'язком Кюрі-Вейса (зокрема, див. Рис. 2.7), тобто з апроксимацією середнього поля для ґраткових моделей. На жаль, адекватність цієї апроксимації викликає великі сумніви, як і доцільність відповідних порівнянь.

2. Насправді існує безліч ґраткових моделей газів або магнетиків або, навіть, бінарних сумішей, які відрізняються розмірністю, геометрією ґраток і числом комірок, що вважаються найближчими сусідами. Однак, в тексті дисертації автор часто використовує терміни модель Ізінга або ґратковий газ не уточнюючи важливі параметри самої моделі.

3. В продовження другого зауваження слід зазначити, що останнім часом ґраткові моделі суттєво розвиваються в напрямку зняття традиційного обмеження взаємодії лише найближчих сусідів. Зокрема, потенціал взаємодії фактично може мати досить складну форму, де просторові обмеження притягальної частини можуть бути незалежними безпосередньо від розмірів твердого ядра, що, своєю чергою, дозволяє розвинути далі авторський підхід. Якщо класична модель Ізінга зі взаємодією найближчих сусідів не зовсім коректно відповідає юкавівським флюїдам з додатковим параметром λ (як на це цілком слушно зауважує в своїй роботі автор), то, можливо, більш доречним

в подальшому було б використання ґраткових моделей зі складнішими потенціалами взаємодії.

В цілому, зроблені зауваження жодним чином не знижують мою позитивну оцінку дисертаційної роботи.

Враховуючи все вище сказане, а також беручи до уваги актуальність, новизну та обґрунтованість отриманих автором наукових результатів, вважаю, що дисертаційна робота “Глобальний ізоморфізм Юкавівських флюїдів та моделі Ізінга” повністю відповідає вимогам пп. 14, 15 та 16 “Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12.01.2022, а її автор, Катц Андрій Михайлович заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

зав. кафедри фізики та математики

Національного університету кораблебудування

ім. адмірала Макарова,

доктор фізико-математичних наук,

професор,

 Ушкац М. В.

Підпис	<i>Ушкац М. В.</i>	засвідчую
Начальник відділу кадрів	<i>Зубарев Д. А.</i>	
“ 30 ”		20 23 р.

