



Затверджую  
Проректор з наукової роботи  
Одеського національного  
університету імені І. І. Мечникова  
Володимир ІВАНИЦЯ

\_\_\_\_\_ 2025 р.

### ВИТЯГ

з протоколу № 7 міжкафедрального наукового семінару  
кафедри фізики та астрономії  
факультету математики, фізики та інформаційних технологій  
Одеського національного університету імені І. І. Мечникова  
від 12 березня 2025 р.

### ПРИСУТНІ:

15 осіб із 17 наукових та науково-педагогічних працівників кафедри  
фізики та астрономії:

Гоцульський Володимир Якович, доктор ф.-м. наук, професор - завідувач  
кафедри,

Ваксман Юрій Федорович, доктор ф.-м. наук, професор - професор кафедри,  
Кулінський Володимир Леонідович, доктор ф.-м. наук, професор - професор  
кафедри,

Маломуж Микола Петрович, доктор ф.-м. наук, професор - професор кафедри,  
Маслеева Наталя Володимирівна, кандидат ф.-м. наук, доцент - доцент кафедри,  
Ніцук Юрій Андрійович, доктор ф.-м. наук, професор - професор кафедри,  
Орловська Світлана Георгіївна, кандидат ф.-м. наук, доцент - доцент кафедри,  
Панько Олена Олексіївна, доктор ф.-м. наук, професор - професор кафедри,  
Поліщук Дмитро Дмитрович, кандидат ф.-м. наук, с.н.с. - доцент кафедри,  
Сидоров Олексій Євгенович, кандидат ф.-м. наук, доцент - доцент кафедри,  
Сминтина Валентин Андрійович, доктор ф.-м. наук, професор - професор  
кафедри,

Сушко Мирослав Ярославович, кандидат ф.-м. наук, доцент - доцент кафедри,  
Чебаненко Анатолій Павлович, кандидат ф.-м. наук, доцент - доцент кафедри,  
Черненко Олександр Сергійович, доктор ф.-м. наук, професор - професор  
кафедри,

Коваль Лариса Анатоліївна, доцент, завідувач лабораторії

На науковому семінарі присутні аспіранти

Кузьмін Станіслав Олександрович

На науковий семінар запрошені

Манакін Вадим Леонідович, вчитель КЗ “Рішельєвський науковий ліцей”,  
старший викладач ОНУ

Катц Андрій Михайлович, вчитель КЗ “Рішельєвський науковий ліцей”,  
к. ф.-м. н.

Семенов Андрій Костянтинович, канд. ф.-м. наук.

З присутніх – 4 докторів наук та 4 докторів філософії/кандидатів наук –  
фахівці за профілем представленої дисертації, та Сминтина В.А – гарант  
освітньої програми.

Головуючий на науковому семінарі – доктор фізико-математичних наук, професор, завідуючий кафедрою фізики та астрономії ФМФІТ Гоцульський В. Я.

### **ПОРЯДОК ДЕННИЙ:**

Обговорення публічної презентації наукових результатів дисертації аспірантки кафедри фізики та астрономії Маслечко Анастасії Миколаївни на тему «Поверхневий натяг молекулярних рідин в рамках підходу глобального ізоморфізму», представленої на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, галузі знань 10 – природничі науки.

Тему дисертації затверджено «15» листопада 2021р. на засіданні Вченої ради факультету МФІТ Одеського національного університету імені І. І. Мечникова, протокол № 2, та «16» листопада 2021р. на засіданні вченої ради Одеського національного університету, протокол № 4.

Робота виконана на кафедрі фізики та астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Науковий керівник: доктор фіз.-мат. наук, професор, Кулінський В. Л.  
(науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ініціали)

### **СЛУХАЛИ:**

1. Доповідь здобувача
2. Запитання до здобувача.

По доповіді було задано 8 запитань, на які доповідач дав правильні та ґрунтовні відповіді. Питання задавали:

професор, завідуючий кафедрою, д.ф.-м. н., Гоцульський Володимир Якович  
професор, д.ф.-м. н., Маломуж Микола Петрович  
професор, д.ф.-м. н., Черненко Олександр Сергійович  
доцент, к.ф.-м.н., Сушко Мирослав Ярославович  
к.ф.-м.н., Катц Андрій Михайлович

3. Виступи присутніх.

З оцінкою дисертації Маслечко А. М. виступили експерти, які зазначили позитивні сторони дисертації, незначні зауваження до презентації та пропозиції щодо її покращення:

доцент, кандидат фізико-математичних наук, Сушко Мирослав Ярославович відмітив, що пропонована робота формально відповідає всім вимогам щодо дисертацій на здобуття ступеня PhD. Головним зауваженням був недостатній фокус на результатах роботи здобувачки під раз останніх років в аспірантурі, окрім публікацій, що були написані раніше. Інші зауваження стосувалися вживаної аспіранткою мови, а саме в роботі зустрічаються терміни буквально перекладені з англійської, що говорить про те, що аспірантка більшу частину літератури засвоїла з іноземних джерел, а також, на термінологію вплинув спосіб апробації на міжнародних конференціях та семінарах. Були побажання щодо покращення термінології під час майбутніх презентацій державною мовою. В цілому, видно, що робота виконана самостійно, результати є оригінальними, тому робота аспірантки Маслечко А. рекомендована до захисту.

професор, доктор фізико-математичних наук, Черненко Олександр Сергійович, зазначив, що під час заслуханої доповіді хоча були представлені результати теоретичних досліджень здобувача, однак вони мають важливе прикладне значення. Проблема приповерхневого особливого шару конденсованих систем, його товщини, яка в різних роботах змінюється від двох до десятків міжмолекулярних відстаней – одна з задач, яка логічно вирішується у цій роботі. Черненко О.С. висловив пропозицію краще підсвітити цей один із основних результатів дисертації у презентації, та запропонував прийняти роботу до розгляду спеціалізованою радою.

В обговоренні взяли участь присутні на науковому семінарі:

професор Гоцунський В. Я., який зазначив, що представлені результати є новими та оригінальними. Висловив побажання, щодо необхідності покращити доповідь, а саме, відокремлювати актуальність від постановки задачі та більш чітко формулювати висновки, відокремлюючи їх від отриманих результатів. Гоцунський В.Я. зауважив, що номінально робота здобувачкою проводилась прогягом 8 років, і останні 3 були спрямовані на проходження формальної освіти PhD та апробації результатів, в цілому, запропонував прийняти роботу до захисту.

професор Маломуж М. П., який відмітив, що особисто не погоджується з деякою термінологією, яка використовуються у роботі, тим не менш вона у поданій формі має слухність, академічність та не має наукових помилок у рамках тієї моделі, що запропонована у дисертації, і не є перешкодою для розгляду роботи спеціалізованою радою. Зауважив, що результати отримані є оригінальними, вони продовжують низку робіт, започаткованих науковим керівником Кулінським В.Л. Загалом рекомендував робота прийняти до розгляду спеціалізованою радою.

З характеристикою здобувача виступив науковий керівник, доктор фізико-математичних наук, професор Кулінський В. Л., який надав позитивну характеристику здобувача, зазначив чинність апробації за допомогою 2-х статей у міжнародних виданнях, віднесених до квантилів Q1 та Q2, відмітив її особистий внесок та запропонував прийняти роботу до захисту.

## ВИСНОВОК

міжкафедрального наукового семінару про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації на тему:

**«Поверхневий натяг молекулярних рідин в рамках підходу глобального ізоморфізму»**

**здобувача ступеня доктора філософії Маслечко Анастасії Миколаївни за спеціальністю 104 Фізика та астрономія**

**1. Актуальність теми дисертації та її зв'язок з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри**

*Дисертація А. Маслечко присвячена темі визначення поверхневого натягу аналітично через модель ґраткового газу. Поверхневий натяг є тією термодинамічною характеристикою, для якої аналітичний розгляд часто є досить складним, і дуже часто неможливим внаслідок просторової неоднорідності межі розділу фаз і через відсутність просторової симетрії. Досі в цілому ряді досліджень для кожної окремої речовини використовуються наближення для функцій розподілу або вигляду кореляційних функцій для аналітичного опису поверхневого натягу. Немало результатів отримано з числового аналізу профілів густини перехідного процесу, які супроводжуються очевидними складнощами у ході інтерпретації експериментальних даних, що пов'язано, наприклад, з урізанням потенціалів взаємодії або іншими припущеннями про розподіл молекул у двофазній системі, та/або кореляційні функції.*

*Підхід ізоморфізму між ізоморфною кубічною ґратковою моделлю та флюїдом Леннарда-Джонса відкриває можливості для значного спрощення аналітичних розрахунків. Це в свою чергу дозволяє повернутися до уявних експериментів, тобто до відкриттів нових сполук у галузях, де поверхневі явища мають велике значення, адже так і суміші речовин можуть бути обчислені аналітично.*

*Роботу було розпочато на кафедрі теоретичної фізики та астрономії і в науково-дослідній лабораторії теоретичної та молекулярної фізики (НДЛ 14) Одеського національного університету імені І.І.Мечникова до її реорганізації у 2022 році та продовжено на кафедрі фізики та астрономії. Вона є складовою частиною досліджень за держбюджетними темами:*

*«Моделювання невпорядкованих гетерогенних та флуктуаційно неоднорідних систем та діагностика їх електричних та оптичних характеристик» № держ. реєстрації 0120U104105 з 2021 по 2023 роки.*

*«Теплофізичні та хімічні процеси в багатокомпонентних та багатофазних середовищах» № держ. реєстрації: 0122U000687 з 2022 по 2025 роки.*

Робота виконана за наступними бібліотечними класифікаторами:

УДК 53.01, 532.6, 536.4, 538.9, 539.6

53 ФІЗИКА

53.01 – Теорія та природа явищ

532.6 – Поверхневі явища. Поверхневий натяг. Капілярність.

536.4 – Вплив підведення тепла та температури на об'єм і структуру тіл

538.9 – Фізика конденсованої матерії. Фізика твердого тіла

539.6 – Міжмолекулярні сили

**2. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів** *Загальна постановка задач у статтях належить проф. В.Л.~Кулінському. При роботі над цими статтями здобувач виконував із науковим керівником паралельні взаємоконтролюючі теоретичні розрахунки, брав участь в інтерпретації результатів та підготовці їх до опублікування. Особисто здобувачем було отримано вираз для коефіцієнта поверхневого натягу флюїду через застосування глобального ізоморфізму до двовимірного ґраткового газу, модифіковано підхід Вудбарі у наближенні Бреґга-Вільямса. На основі перетворення глобального ізоморфізму розраховані критичні амплітуди поверхневого натягу, густини та інших термодинамічних величин. Було зроблено переважну частину аналізу та обробки даних робіт з результатами комп'ютерного моделювання, присвяченого фазовим переходам “рідина - пар” для різноманітних реальних та модельних флюїдів, а також ґраткових моделей.*

**3. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій**

Результати дисертаційної роботи підтверджуються даними незалежних робіт з розрахунками лінійного та поверхневого натягу систем модельного флюїду Леннарда-Джонса, відповідністю результатів значенням з бази даних NIST молекулярних властивостей флюїдів, а також результатами апробації на наукових семінарах та конференціях.

#### **4. Наукова новизна результатів дисертації**

В дисертаційній роботі були отримані наступні результати:

- Удосконалено теорію з розрахунку коефіцієнта поверхневого натягу ґраткового газу, а саме модифіковано вираз Вудбарі для відтворення правильної критичної асимптотики;
- Вперше застосовано перетворення ізоморфізму з ґратковим газом для визначення поверхневого натягу флюїду як у 2D через розв'язок Онзагера, та і у 3D просторі;
- Введено поняття “ефективної” товщини поверхні, як одного з керуючих параметрів для визначення коефіцієнта поверхневого натягу. Продемонстровано, що її фізичний зміст відповідає кореляційній довжині;
- Вперше застосовано перетворення глобального ізоморфізму до кореляційної довжини системи як у двовимірному, так і тривимірному просторах;
- Показано зв'язок кореляційної довжини у околі потрійної точки з середньою відстанню між частинками, визначено обмеження знизу допустимого для ізоморфізму з ґратковим газом діапазону температур;
- Окреслено множину “ізінгівських” флюїдів, які відтворюються через ізоморфізм з ізоморфною моделлю ґраткового газу.

**5. Теоретичне та практичне значення результатів дисертаційної роботи**  
**Основні результати дисертаційної роботи стосуються визначенню температурної залежності коефіцієнта поверхневого натягу для реальних та модельних флюїдів через ізоморфізм з ґратковим газом, т.зв. глобальний ізоморфізм.**

Застосування глобального ізоморфізму до обчислення поверхневих властивостей флюїду дозволяє аналітично значно спростити відому на сьогодні методологію розрахунків цієї фізичної величини. Точні інтегро-диференціальні рівняння типу Кірквуда-Бафа та Орнштейна-Церніке сьогодні дозволяють дослідникам визначати

дану фізичну величину лише спираючись на апарат наближених розрахунків. Це наближення середнього поля, методи coarse grain, методи розкладу в ряд, симуляцій методами монте-карло та молекулярної динаміки, та квантові симулятори на основі DFT. Аналітична простота таким чином втрачається. Запропонований здобувачем метод не тільки відновлює аналітичну простоту, але і узагальнює результат для різноманітних речовин, що дозволяє говорити по аналог нового принципу відповідних стані.

Використання кореляційної довжини, як ще однієї характеристики флюїду підпорядкованій перетворенням ізоморфізму з ґратковою моделлю, дозволяє не лише ввести ще одну просторову величину, що відтворюється за рахунок ґраткового газу, але і звести всі параметри апроксимації для обчислення коефіцієнта поверхневого натягу до мінімуму, на відміну від відомих наближень, таких як градієнтне наближення ван дер Ваальса, формула Етвеша та паракор. Наявність аналітичного виразу для поверхневих явищ відкриває можливості для дослідження нових властивостей комбінацій речовин у експериментальних галузях, що часто для теоретичного апарату у загальному вигляді є невід'ємною задачею.

#### **6. Оцінка структури та обсягу дисертації, її мови та стилю**

Дисертація за обсягом, структурою, мовою та стилем викладення, а також оформленням відповідає вимогам МОН України та освітньо-наукової програми.

#### **7. Оцінка роботи щодо ознак академічного плагіату.**

Дисертаційна робота була перевірена автоматизованим сервісом пошуку плагіату Strikeplagiarim.com. Результати перевірки зафіксовано в звіті від 20.02.2025 Сектора моніторингу плагіату НБ ОНУ. Згідно Висновку комісії з етики та академічної доброчесності кафедри фізики та астрономії ОНУ ім.І.І. Мечникова, за результатами перевірки дисертація Маслечко Анастасії Миколаївни доктора філософії визнана оригінальною роботою, яка не містить елементів академічного плагіату. Отже, дисертаційна робота незалежна і може бути рекомендована до захисту. Інші факти, виявлені при розгляді роботи, відсутні.

#### **8. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації**

За матеріалами дисертації опубліковано 2 статті у періодичних наукових виданнях проіндексованих у базах WoS або Scopus, статті у Q1—Q2:

- Maslechko A. Surface tension of the liquid–vapor interface of the Lennard-Jones fluids from the Ising model / V. L. Kulinskii, A. Maslechko // Journal of Physical Chemistry C. – 2016. – Vol. 120, iss. 16. – P. 8790–8803.
- Maslechko A. Surface tension of molecular liquids: Lattice gas approach / A. Maslechko, K. Glavatskiy, V. L. Kulinskii // Journal of Molecular Liquids. – 2017. – Vol. 235. – P. 119–125.

#### **9. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо.**

Основні положення дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на семінарах кафедри теоретичної фізики та астрономії і наукових конференціях та семінарах:

- 7-th International Workshop and Summer School on Nonequilibrium Thermodynamics. Hilvarenbeek (Netherlands), July 5–10, 2015;
- MOLSIM: Understanding Molecular Simulation – Winter school at Amsterdam Center for Multiscale Modeling. Amsterdam (Netherlands), January 4–15, 2016;
- 8-th International Conference “Physics of Liquid Matter. Modern Problems“. Kyiv

(Ukraine), May 18–22, 2018;

• 22 Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 24–25 листопада, 2022;

• HEUREKA: International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics, Lviv (Ukraine), May 16-18, 2023;

У ході обговорення дисертації до неї не було висунуто жодних зауважень щодо самої суті роботи.

### УХВАЛИЛИ:

1. Затвердити висновок про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації Маслечко Анастасії Миколаївни

(прізвище, ім'я, по батькові здобувача)

на тему «Поверхневий натяг молекулярних рідин в рамках підходу глобального ізоморфізму».

2. Констатувати, що дисертація Маслечко Анастасії Миколаївни

(прізвище, ім'я, по батькові здобувача)

за своїм науковим рівнем, новизною отриманих результатів, теоретичним та практичним значенням, змістом та оформленням повністю відповідає вимогам, що пред'являють до дисертацій на здобуття ступеня доктора філософії.

3. Наукові результати дисертації висвітлено у 2 наукових публікаціях, що відповідають вимогам чинного законодавства для здобуття ступеня доктора філософії. З них 2 статті у виданнях, які входять до міжнародних наукометричних баз Web on Science Core Collection та Scopus тощо.

4. Рекомендувати дисертацію Маслечко Анастасії Миколаївни

(прізвище, ім'я, по батькові)

«Поверхневий натяг молекулярних рідин в рамках підходу глобального ізоморфізму», подану на здобуття наукового ступеня

доктора філософії, з галузі знань 10 – природничі науки

(галузь знань)

за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

(код і найменування спеціальності)

для подання до захисту у разовій спеціалізованій вченій раді.

Результати голосування щодо затвердження Висновку та рекомендації до захисту дисертації:

За

шістнадцять

Проти

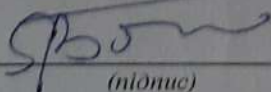
немає

Утримались

-

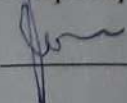
один

Головуючий на міжкафедральному науковому семінарі:

  
(підпис)

професор, зав. каф. Гоцульський В. Я.  
(посада, прізвище, ініціали)

Секретар кафедри:

  
(підпис)

доцент, Коваль Л. А.  
(посада, прізвище, ініціали)