

РЕЦЕНЗІЯ

офіційного рецензента на дисертацію Маслечко Анастасії Миколаївни «Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму», подану на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104-фізика та астрономія

Актуальність тематики дослідження.

Однією із найважливіших характеристик міжфазної рівноваги однокомпонентних систем є коефіцієнт поверхневого натягу, при цьому дослідження просторово неоднорідних станів є значно складнішим, ніж двох окремих однорідних фаз. Існуючий класичний метод теорії рідин – інтегральних рівнянь для кореляційних функцій – стикається з великими аналітичними труднощами з розв'язку цих рівнянь. Таким чином побудова таких термодинамічних функцій як коефіцієнт поверхневого натягу є дуже складною процедурою з великою кількістю неконтрольованих наближень, які в сучасності переважно потребують великої кількості машинного часу та залучення комп'ютерних кластерів.

У дисертаційній роботі Маслечко А. М. пропонується новий спосіб визначення поверхневих характеристик – через ізоморфізм рідин з ґратковим газом. На основі гіпотези так званого глобального ізоморфізму, який раніше виявився успішним для опису об'ємних характеристик простих рідин та газів з двопараметричними потенціалами, розроблено алгоритм обчислення коефіцієнта поверхневого натягу. У процесі свого дослідження здобувачем було підкреслено важливість існування аналітичного виразу для визначення коефіцієнта поверхневого натягу ґраткового газу, і, якщо у двовимірному просторі точний вираз існував давно, то у тривимірному – точного розв'язку ґраткової моделі не існує. Авторка хоч і не вирішила цю складну математичну задачу, взяла за основу наближений розв'язок Вудбарі, та модифікувала його для забезпечення правильної критичної асимптотики, чого оригінальний вираз був позбавлений. Важливим наслідком пошуків аналітичних розв'язків проблеми у роботі є виникнення додаткового просторового параметру, що описує молекулярний шар розділу фаз, який названо ефективною товщиною. Існування параметра, що відповідає за розмір перехідної області в різних підходах обґрунтовіється з різних міркувань, часто формалізованих, а у здобувачки він знаходить фізичний зміст.

Структура і зміст дисертаційної роботи

Робота складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків та переліку використаних літературних джерел. Загальний обсяг дисертації 127 сторінок, з них основної частини 109 сторінок, список джерел складається зі 104 найменувань.

Перший розділ “ІСНУЮЧІ МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТА ПОВЕРХНЕВОГО НАТЯГУ” розпочинається з аналізу сучасних експериментальних способів дослідження поверхневих явищ та їх практичного застосування. Опис теоретичних моделей розпочато з підходу Лапласа, який вперше спробував пов’язати поверхневий натяг з міжмолекулярною взаємодією. Далі наводиться розвиток теоретичних моделей, який завершується сучасною методикою, що полягає у тому що складні інтегральні рівняння Орнштейна-Церніке або Кірквуда-Бафа розв’язують за допомогою комп’ютерних симуляцій типу молекулярної динаміки, методів Монте-Карло, тощо. Розділ завершується анонсом про те, що метод ізоморфізму рідини з ґратковою моделлю дозволить отримати коефіцієнт поверхневого натягу, обійшовши труднощі інтегральних рівнянь.

У Другому розділі “ОБГРУНТУВАННЯ МЕТОДИКИ ОБЧИСЛЕННЯ КОЕФІЦІЄНТА ПОВЕРХНЕВОГО НАТЯГУ ЧЕРЕЗ ІЗОМОРФІЗМ З ҐРАТКОВИМ ГАЗОМ” наводяться основні положення, на яких базуються проективні перетворення глобального ізоморфізму та основні результати щодо їх застосування до об’ємних характеристик модельних рідин з потенціалом взаємодії типу Леннарда-Джонса.

Третій розділ “ОБЧИСЛЕННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОДЕЛЬНОГО ФЛЮЇДУ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА” включає у собі результати застосування проективних перетворень глобального ізоморфізму для визначення коефіцієнта поверхневого натягу моделі Леннарда-Джонса у двовимірному випадку. Також наводяться обчислення критичних амплітуд для коефіцієнта поверхневого натягу у 2D і 3D просторах, разом з критичною амплітудою густини та кореляційної довжини. Завершується розділ переліком проблем, які виникають при прямому застосуванні теорії до тривимірних систем.

У четвертому розділі “ЗАСТОСУВАННЯ ГЛОБАЛЬНОГО ІЗОМОРФІЗМУ ДО ПОВЕРХНЕВОГО НАТЯГУ РЕАЛЬНИХ ФЛЮЇДІВ” більш розгорнуто автор підходить до обчислення коефіцієнта поверхневого натягу у випадку реальних систем. Велика увага приділяється додатковому керуючому параметру, який впливає з міркувань про правильну критичну асимптотику у виразі для коефіцієнта поверхневого натягу моделі Ізінга – так званій “ефективній” товщині поверхні. Розроблений вираз використовується в подальшому до тривимірної моделі Леннарда-Джонса, а також порівнюється

результати з відомими значеннями коефіцієнта поверхневого натягу вздовж бінодалей поширених простих речовин.

Ступінь обґрунтованості результатів, їх наукова новизна та практичне значення

Основними результатами дисертаційної роботи є обчислення температурної залежності для коефіцієнта поверхневого натягу рідини та ефективної товщини міжфазового шару із застосування методу глобального ізоморфізму у двовимірних та тривимірних системах. Перевірка результатів роботи

Це дає нові результати для теорії фізики рідкого стану та процесів переносу, розширює область застосування ґраткових моделей у молекулярній фізиці.

На мою думку, в роботі підхід ізоморфізму отримав своє підтвердження і на базі отриманих у роботі результатів може бути розвинений і у подальшому.

Повнота наукових положень дослідження у дисертації та публікаціях.

Результати досліджень здобувачки А. М. Маслечко пройшли апробацію у 7 публікаціях: це 2 наукові статті у наукових виданнях, віднесених до першого та другого кuartилів відповідно до баз даних Web of Science Core Collection та Scopus, та тези у збірках доповідей на 5 наукових конференціях.

Відомості про дотримання академічної доброчесності.

У дисертації та наукових публікаціях А. М. Маслечко відсутні порушення академічної доброчесності. Система перевірки Strikeplagiarism.com показала оригінальність тексту на рівні 96,48%.

Зауваження до дисертації.

В якості зауважень можна виділити наступне:

1. При досить чіткому викладенні матеріалу у тексті дисертації є неточності у формулюваннях та стилістичні невизначеності. Наприклад термін «парахор» набуває то жіночого то чоловічого роду.

2. Виникає певна невизначеність з позначенням температури. Наприклад, одне з перших використань t (Рис.1.3 – це просто температура). Але це стандартне позначення нормованої температури на критичну. Але далі використовується та сама t «тільдою» як нормована на критичну.

3. Деякі заяви є дещо необґрунтованими. Наприклад, у висновках до розділу 1 говориться «Точність експериментальних установок є різною, але при вимірюванні відстаней...», але у більшості експериментальних методів

при визначенні коефіцієнту поверхневого натягу вимірюється або тиск, або сила. Переміщення при цьому не обмежується товщиною поверхневого шару.

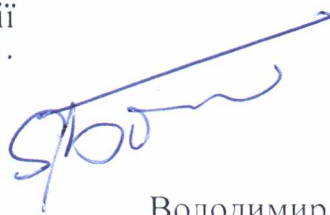
Загальний висновок про рівень набуття здобувачем теоретичних знань, відповідних умінь, навичок та компетентностей. Усі наведені недоліки аж ніяк не впливають на позитивну оцінку дисертації. Зауваження можуть бути предметом подальших досліджень автора. Здобувач Анастасія Маслечко впродовж навчання опанувала базові аналітичні методи теорії рідкого стану, добре засвоїла методи комп'ютерного моделювання, свої організаційні навички відточувала під час співробітництва з Рішельєвським науковим ліцеєм, виконуючи обов'язки секретаря Всеукраїнського турніру юних фізиків, а також фасилітатора космічних проектів для школярів України у програмі NASA.

Висновок щодо відповідності дисертації нормам.

Дисертація Маслечко А. М. на тему "Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму", подана на здобуття ступеня доктора філософії є завершеним дослідженням, яке розглядає актуальні проблеми фізики конденсованої речовини. Отримані результати дають змогу дослідити поверхневі явища однокомпонентних систем та переглянути вплив ґраткових моделей на опис фазових переходів. Вважаю, що за новизною, актуальністю, обсягом та практичним значенням дисертація та наукові статті відповідають вимогам пп. 6, 8 та 9 "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 № 44 (зі змінами), а їх автор, Маслечко Анастасія Миколаївна, заслуговує на присудження їй ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 фізика та астрономія.

Рецензент:

завідувач кафедри фізики та астрономії
факультету МФІТ ОНУ
імені І.І.Мечникова,
доктор фізико-математичних наук,
професор.



Володимир ГОЦУЛЬСЬКИЙ



ОСОБИСТИЙ ПІДПИС ПІДТВЕРДЖУЮ
Перший проректор ОНУ ім. І.І.Мечникова

Майя НІКОЛАЄВА

06 " 05 2025 р.