

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

У роботі Маслечко А. М. обговорюється проблема визначення коефіцієнта поверхневого натягу рідин. Демонструються існуючі експериментальні та теоретичні методи дослідження поверхневих явищ. Показується як в теорії рідинного стану обчислення термодинамічних потенціалів впливає з інтегральних рівнянь -- розв'язків нескінченної послідовності рівнянь ББГКІ, для яких в залежності від виду припущень про потенціал взаємодії та функції розподілу молекул отримуються сучасні результати для кожної речовини. Вказується важливість коефіцієнта поверхневого натягу речовини як індикатора адекватності рівняння стану, та неможливість за існуючими числовими результатами провести цей аналіз.

Маслечко А. М. пропонує метод ізоморфізму з ґратковою моделлю у якості можливого підходу для усунення ускладнень, що виникають з традиційних методів обчислення коефіцієнта поверхневого натягу. Даний метод базується на проєктивному перетворенні для параметрів кривої співіснування – густини та температури – для моделей Ізінга та рідини, і дозволяють визначити характеристики рідини через відповідні ґраткової моделі, якщо встановлена аналітична залежність шуканої характеристики від густини та температури. У роботі поставлена задача пошуку залежності коефіцієнта поверхневого натягу від температури та густини у всьому діапазоні температур від потрібної до критичної, де водночас застосовується ізоморфізм з ґратковою моделлю, що є проявом глобального ізоморфізму на противагу критичному. В роботі проведено аналіз даних для бінодалей багатьох простих флюїдів, визначено вирази для поверхневого натягу у двовимірному та тривимірному просторах, базуючись на підходах Онзагера та Вудбарі відповідно. Для останнього здобувачка Маслечко А. М. розробила модифікацію з використанням наближення Бреґга-Вільямса, що відтворює правильну критичну асимптотику моделі Ізінга.

У роботі Маслечко А. М. отримано наступні наукові результати:

1. Розроблено алгоритм обчислення коефіцієнта поверхневого натягу на границі “рідина-пара” однокомпонентних систем через ізоморфізм простою кубічною ґратковою моделлю.
2. Запропоновано вираз для аналітичного обчислення коефіцієнта поверхневого натягу ґраткової моделі, що відтворює існуючу критичну асимптотику.

3. Отримано точний вираз для обчислення поверхневого натягу для двовимірних систем.
4. Введено поняття «ефективної» товщини поверхні, визначено її фізичний зміст.
5. Обчислено критичні амплітуди поверхневого натягу, густин та кореляційних довжин через ізоморфізм з моделлю Ізінга.
6. Вказано границі застосування проективного перетворення між моделями ґраткового газу та рідини через оцінку потрібної точки з використанням введеного поняття ефективної товщини поверхні. Також проаналізовано групи речовин і окреслено клас речовин, для яких проективне перетворення є адекватним.

В цілому, в дисертації А. М. Маслечко сформульовані завдання, необхідні положення та повністю розкрито їх зміст відповідно до тематики дослідження. Вони відображені у 2-х наукових публікаціях, проіндексованих у наукометричній базі Scopus Q1-Q2, та доповідалися на 4-х міжнародних конференціях та всеукраїнській школі-семінарі.

В якості зауважень можна виділити наступне:

1. Основний текст дисертації (в розділах 2-4) викладений доволі складно. Пропущені деякі пояснення при отриманні теоретичних залежностей, що ускладнюють їх перевірку. В оригінальних розділах роботи (3 та 4) іноді важко зрозуміти де саме власні результати, а де інших авторів.

2. В другому досліді вказано, що модель ґратки добре описана в деяких джерелах 1970 року. Переваги описаного в роботі підходу глобального ізоморфізму не зовсім чітко виділені. Так порівняння наявних експериментальних даних в графічному вигляді проводиться, зазвичай, тільки з результатами власних результатів. Тому твердження, що перетворення ГІ дозволяють КРАЩЕ відтворити температурну залежність поверхневого натягу в широкому інтервалі температур (С. 68) не є повністю доведеним.

3. На рис. 4.11-4.26 представлені однотипні графічні залежності для великої кількості реальних флюїдів. Чому не можна було їх якось об'єднати? І не зовсім зрозуміло використання терміну «реальні флюїди» в четвертому розділі, коли в третьому розділі були описані результати для відомих речовин.

4. При обговоренні проблеми нормування поверхневого натягу використані різні підходи, але позначення безрозмірного коефіцієнта поверхневого натягу залишається незмінним, як і розмірного (рис. 3.9, 3.11, 4.10 і наприклад (4.26)). Так на вказаних рис. однотипні залежності дають узгодження/неузгодження кривих в рамках одного класу.

5. Висновок, що на роль «ефективної» товщини поверхні може претендувати кореляційна довжина, формується на основі узгодження давно «відомої» залежності з параметром, який підбирається, з твердженням «Теоретичні

залежності мусять відповідати правильним критичним амплітудам та експонентам». Тому кінцевий висновок «Таким чином використання кореляційної довжини у якості параметра ефективної товщини ми вважаємо правомірним» є суперечливим.

Дані зауваження, однак, в жодній мірі не знижують цінність дослідження і не ставлять під сумнів їх достовірність. Результати можуть бути використані для подальших досліджень у галузі фізики конденсованого стану.

Враховуючи актуальність, новизну та обґрунтованість отриманих Маслечко А. М. результатів, вважаю, що її дисертаційна робота "Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму" та подані за темою наукові статті повністю 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.

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

Олександр ЧЕРНЕНКО

А. Черненко



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

Майя НІКОЛАЄВА

20 р.