

Голові разової спеціалізованої вченої ради
Одеського національного університету
імені І. І. Мечникова
Маломужу Миколі Петровичу,
доктору фізико-математичних наук, професору,
професору кафедри фізики та астрономії
Одеського національного університету
імені І. І. Мечникова

ВІДГУК

офіційного опонента **Гаврюшенка Дмитра Анатолійовича** на дисертаційну роботу **Маслечко Анастасії Миколаївни «Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму»**, поданої на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія

У дисертаційній роботі Маслечко А.М. розглядаються актуальні питання, що стосуються дослідження рівноваги рідина-пара ґратчастих флюїдів, зокрема визначення температурної залежності поверхневого натягу на межі «рідина – пара» за допомогою підходу ізоморфізму з ґратчастим газом.

І. Актуальність теми дисертаційної роботи

Актуальність роботи Маслечко А.М. обумовлена тим, що для такої термодинамічної характеристика рідинних систем, як поверхневий натяг, аналітичний розгляд є складним внаслідок відсутності просторової симетрії. В ряді сучасних досліджень для аналітичного опису поверхневого натягу для кожної речовини використовуються наближення для відповідних кореляційних функцій. Велика кількість результатів була отримана за допомогою аналізу профілів густини перехідного процесу, а самі речовини розглядаються незалежно одна від одної, спільні властивості визначаючи лише в рамках принципу відповідних станів ван дер Ваальса. Сучасний підхід ізоморфізму між ізоморфною кубічною ґратчастою моделлю та флюїдом Леннарда-Джонса відкриває можливості для значного спрощення аналітичних розрахунків, що, в свою чергу, дозволяє повернутися до відкриттів нових сполук у галузях, де поверхневі явища мають велике значення. Крім того, застосування ізоморфізму з ґратчастим газом дає можливість визначити параметри знерозмірювання для рідинних систем.

Запропоноване автором застосування підходу глобального ізоморфізму для рідинних систем обумовлює як актуальність, так і практичну цінність дисертаційної роботи Маслечко А.М.

У роботі Маслечко А.М. були поставлені наступні **задачі**:

- Дослідити існуючі методи, як теоретичні, так і експериментальні, визначення поверхневих властивостей речовини.

- Розробити алгоритм для відтворення коефіцієнту поверхневого натягу на межі «рідина – пара» через ізоморфізм з гратчастим газом. Застосувати метод у двовимірному і тривимірному просторах.
- Перевірити можливість обчислення коефіцієнту поверхневого натягу модельних флюїдів, типу ван дер Ваальса.
- Визначити характерні параметри для опису міжфазної поверхні, та перевірити їх відтворюваність через ізоморфізм з моделлю Ізінга.
- Оцінити температуру потрійної точки, тим самим визначити нижню межу діапазону температур для перетворень ГІ.
- Визначити межі застосування теорії.

Усі ці задачі є **актуальними** та своєчасними як з фундаментальної точки зору, так і з точки зору практичного використання результатів дослідження. Дисертаційна робота Маслечко А.М. виконано в рамках держбюджетних науково-дослідних тем, затверджених директивними органами. Таким чином, актуальність досліджень, представлених в дисертації Маслечко А.М., не викликає сумнівів.

У цілому тема дисертаційної роботи Маслечко А.М. повністю відповідає спеціальності 104 Фізика та астрономія галузі знань 10 Природничі науки.

II. Загальні відомості про структуру дисертації

Дисертація має структуру завершеної науково-дослідної роботи. Рукопис викладено на 127 сторінках, і він повністю відповідає вимогам щодо оформлення дисертацій. Текст дисертації складається з анотації, вступу, розділу з оглядом літератури і формулюванням методики дослідження, та двох розділів основної частини, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також загальних висновків, розділу з подяками, списку використаних літературних джерел з 79 найменувань та двох додатків. Робота містить 45 рисунків та 19 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 що до апробації, структури і обсягу дисертації.

У *першому розділі* наведено результати аналізу літературних джерел щодо існуючих методів визначення коефіцієнту поверхневого натягу. Автором зацентовано увагу на теоретичних методах з аналітичного визначення коефіцієнту поверхневого натягу на межі «рідина–пара», описано застосування тензору тиску в підході Кірквуда-Бафа до обчислення коефіцієнта поверхневого натягу, описано труднощі, що виникають при загальному обчисленні коефіцієнта поверхневого натягу різноманітних речовин, зокрема, вказано на те, що за допомогою точних інтегральних рівнянь можна отримати результат лише шляхом побудови спрощень у припущень про конкретний вигляд профілю густини, кореляційни функцій та конкретизації потенціалу взаємодії.

У *другому розділі* застосування підходу глобального ізоморфізму до ізоморфізму молекулярних рідин та гратчастого газу. Зокрема, детально описано паралелі між застосуванням гратчастої моделі для опису спонтанної намагніченості

та фазовим переходом «рідина – пара». Для підготовки обґрунтування вибраної методики сформульовані основні емпіричні співвідношення для речовин, що узгоджуються з рівнянням стану ван дер Ваальса. Описано підхід глобального ізоморфізму, а саме трансформаційні перетворення, які дозволяють перейти від параметрів густини x та температура t ґратчастого газу на кривій співіснування до параметрів густини ρ та температура T молекулярного флюїду, і навпаки. Автором продемонстрована подібність між ґратчастою моделлю та флюїдом Леннарда-Джонса, а також наведено алгоритм з приведення важливих величин до безрозмірного вигляду, для флюїду були відтворені такі термодинамічні властивості, як критична стисливість та фугітивність.

У третьому розділі розглянуто застосування описаних у другому розділі перетворень глобального ізоморфізму до обчислення поверхневого натягу флюїду Леннарда-Джонса. Автором продемонстровано, що складова термодинамічного потенціалу з поверхневим натягом відокремлюється від об'ємного внеску не лише для флюїду, але і для ґратчастого газу, що значно спрощує використання перетворень глобального ізоморфізму. Також запропоновано методи обчислення поверхневого натягу для ґратчастої моделі, описано рівняння Вудбарі для моделі Ізінга будь-якої розмірності. Точний розв'язок Онзагера для двовимірної ґратки використано для того, щоб адаптувати підхід Вудбарі, а також продемонструвати валідність розробленого теоретичного підходу. Отримано вираз для поверхневого натягу двовимірного флюїду, проведено порівняння отриманих теоретичних результатів з доступними даними комп'ютерних моделювань. Важливо відзначити, що в цьому розділі проведено також аналіз критичних амплітуд поверхневого натягу та густини, а також відношення кореляційних довжин за допомогою співвідношення Фіска-Відома.

У четвертому розділі розглянуто ширину поверхні розділу фаз. За допомогою виразу Тріценберга-Цванціґа модифіковано вираз Вудбарі для коефіцієнту поверхневого натягу ґратки у тривимірному випадку. Введено поняття «ефективної» ширини поверхні, отримано вираз асимптотики цієї величини. Автором показано, що кореляційна довжина може виступати керуючим масштабним параметром. Побудовано застосування перетворення глобального ізоморфізму до кореляційної довжини, проведено порівняння отриманої теоретичної температурної залежності коефіцієнту поверхневого натягу з результатами комп'ютерного моделювання для двовимірного флюїду. Крім того, перевірено відтворюваність значень коефіцієнту поверхневого натягу для простих флюїдів.

Висновки містять основні результати роботи.

У додатках 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 перетворення ізоморфізму з ґратчастим газом для визначення поверхневого натягу флюїду як у 2D, та і у 3D просторі; вдосконалено теорію розрахунку коефіцієнта поверхневого натягу ґраткового газу, а саме модифіковано вираз Вудбарі для відтворення правильної критичної асимптотики; введено поняття «ефективної» товщини поверхні, як одного з керуючих параметрів для визначення коефіцієнта

поверхневого натягу; застосовано перетворення глобального ізоморфізму до кореляційної довжини системи як у двовимірному, так і тривимірному просторі; продемонстровано зв'язок кореляційної довжини у околі потрійної точки з середньою відстанню між частинками; визначено обмеження знизу допустимого для ізоморфізму з ґратчастим газом діапазону температур; окреслено множину «ізінгівських» флюїдів, які відтворюються через ізоморфізм з ізоморфною моделлю ґраткового газу.

V. Практичне значення отриманих результатів

Результати, отримані в роботі, дозволяють значно спростити відому на сьогодні методологію дослідження поверхневих властивостей флюїду. Використання кореляційної довжини, як ще однієї характеристики флюїду, підпорядкованій перетворенням глобального ізоморфізму, дозволяє звести всі параметри підгонки до мінімуму для незалежного обчислення поверхневого натягу, на відміну від відомих наближень. Наявність аналітичного виразу для опису поверхневих явищ відкриває можливості для дослідження нових властивостей комбінацій речовин в експериментальних галузях

VI. Апробація результатів та повнота викладення в опублікованих працях

За результатами дисертаційного дослідження опубліковано 7 наукових праць, з них 2 статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Scopus (Q1 та Q2), та 5 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 особисто здобувачем було отримано вираз для коефіцієнта поверхневого натягу флюїду через застосування глобального ізоморфізму до двовимірного ґратчастого газу; модифіковано підхід Вудбарі у наближенні Бреґга-Вільямса; на основі перетворення глобального ізоморфізму розраховані критичні амплітуди поверхневого натягу, густини та інших термодинамічних величин.

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 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, відповідають поставленій меті роботи та її змісту. Результати дисертаційної роботи відповідають змісту статей, що

надруковані у фахових журналах.

ІХ. Зауваження та побажання

Разом із загальною позитивною оцінкою роботи, дисертація не позбавлена деяких недоліків:

1. Висновки як до окремих розділів, так і до всієї роботи в цілому сформульовані нечітко та недбало, крім того, вони перемішані з отриманими результатами. Висновки 1, 2 та 4 до розділу 2 сформульовано незрозуміло та некоректно.
2. На початку параграфу 2.4 не обґрунтовано, чому доля опису газу Леннард-Джонса застосовується саме рівняння ван дер Ваальса, тоді як вираз для відповідного потенціалу давно відомий.
3. На сторінці 49 проведено порівняння коефіцієнтів рівняння стану ван дер Ваальса з відповідними коефіцієнтами віріального рівняння (рівнянням Камерлінг-Оннеса), про що не сказано. За допомогою відомого виразу (2.9) отримано вираз (2.10) та цей же вираз, наведений раніше (на початку сторінки). Проте не вказано, що цей перехід для модельного потенціалу Леннард-Джонса та навіть потенціалу Сюзерленда відповідає високотемпературному наближенню.
4. Обидва твердження у другому абзаці стор. 73 є слабко обґрунтованими. Зокрема, для оцінки вагомості внеску квантових ефектів можна було застосувати відомий критерій де Бура.
5. Для більшості наведених у тексті дисертації даних не вказано похибки розрахунків. Так, у таблиці 4.1 бажано навести хоча б похибки апроксимації.
6. Наведені на рис. 4.11 – 4.26 та в таблиці 4.3 дані потребують більш детального опису.
7. Pdf-файл оформлено вдало, що полегшує роботу з ним. Проте в тексті дисертації наявні деякі недоліки редакційного та стилістичного характеру. Наприклад:

- скорочення vdW застосовується для ван дер Ваальса, так для відповідного наближення.
- у тексті зустрічається велика кількість наукових жаргонізмів та вад стилю, таких як «зв'язок між параметрами Л-Дж», «взаємодія ґраткового газу», «графік даних коефіцієнта поверхневого натягу». «являє собою» тощо.

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 Маслечко А.М.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Маслечко Анастасії Миколаївни «Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму» 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 Маслечко Анастасія Миколаївна 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

Д.А. Гаврюшенко

ПІАПКС ЗАСВІАЧУЮ
ВЧЕНИЙ СЕКРЕТАР НАДЧ
КАРАУЛЬНА Н.В.
08.05.2025р.

