

ВІДГУК

офіційного опонента 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

Дисертаційна робота Маслечко Анастасії Миколаївни присвячена дослідженню явища поверхневого натягу молекулярних рідин на межі “рідина-пара”. Методика обчислень у роботі ґрунтується на ізоморфізмі флюїду з ґратковою моделлю, який аналітично представляється у вигляді проєктивного перетворення між параметрами кривих співіснування для даних моделей.

Актуальність тематики дослідження.

Традиційно теоретичні моделі обчислення коефіцієнта поверхневого натягу, як одного із термодинамічних потенціалів, містять ряд припущень для ефективного розв’язування виникаючих інтегральних рівнянь. Тому сучасні здобутки щодо поверхневого натягу речовин часто базуються на машинних експериментах, в основі яких лежать різноманітні потенціали взаємодії та функції розподілу. Природно, точність таких підходів обмежується розміром кластеру, що піддається симуляції, відстанню обрізання потенціалу, проміжком часу для досягнення збіжності тощо. Відповідно, розробка нових методів, які б не були пов’язані з наближеними розв’язками складних рівнянь теорії рідинного стану та не використовували б певні апроксимації без строгого теоретичного обґрунтування, є важливим напрямком дослідження поверхневих явищ. Використання ізоморфізму рідин з ґратковою моделлю призводить до аналітичного обчислення термодинамічних величин, в тому числі коефіцієнта поверхневого натягу, без необхідності розв’язування відомих складних інтегральних та диференціальних рівнянь, і при цьому точність методики є досить високою в широкому діапазоні температур, від потрійної точки до критичної.

Обґрунтованість результатів, їх наукова новизна.

Застосування проєктивного перетворення до визначення коефіцієнта поверхневого натягу є новим результатом, що одночасно дозволило розробити аналітичний апарат для обчислення коефіцієнта поверхневого натягу тривимірної моделі Ізінга.

До основних результатів роботи А. М. Маслечко можна віднести наступне: представлено вираз для обчислення поверхневого натягу двовимірного флюїду; удосконалено аналітичні методи обчислення коефіцієнта поверхневого натягу як тривимірної моделі Ізінга так і реального флюїду; введено просторовий параметр, що описує міжфазну поверхню – “ефективну товщину” – та описано її фізичний зміст і методи обчислення.

У роботі Анастасії Маслечко сформульовано актуальні завдання та необхідні положення, розкрито їх зміст відповідно до тематики дослідження. Результати дисертації відображені у двох наукових публікаціях, проіндексованих у наукометричній базі Scopus Q1-Q2, та апробовані на 5 наукових конференціях.

Структура і зміст дисертації.

Робота складається з чотирьох розділів, до кожного з яких наведено висновки. Наприкінці дисертація містить перелік найважливіших результатів роботи винесених на захист. Загальний обсяг дисертації 127 сторінок, її основна частина викладена на 109 сторінках, список джерел містить 104 найменування.

У Першому розділі наведено огляд існуючих методів визначення коефіцієнта поверхневого натягу. Зокрема наведено більше 10 експериментальних методів, та продемонстровано еволюцію уявлень про теоретичний опис поверхневих явищ. Проведений аналіз приводить авторку до висновку, що ізоморфізм з ґратковими моделями зможе дати новий шанс теоретичним пошукам.

У Другому розділі сформульовано методику обчислення термодинамічних потенціалів через ізоморфізм з ґратковою моделлю. Спочатку показані міркування зі статистичної фізики, що демонструють можливість формального зв'язку між принципово різними моделями – між континуальною хаотичною структурою рідини з парою та дискретною ґратковою моделлю речовини. Далі наведені співвідношення для кривої співіснування рідкої та газоподібної фаз у

координатах густини та температури, а саме закон прямолінійного діаметра та закон Батчінського. Базуючись на подібності бінодалей ґраткового газу та рідини, приведено проєктивне перетворення для густини та температури відповідних моделей. Таким чином, для обчислення термодинамічних величин пропонується отримати аналітичну залежність від цих двох параметрів, щоб застосування ізоморфізму мало теоретичне обґрунтування.

Третій розділ розпочинається з демонстрації зв'язку поверхневих складових функції Гамільтона рідини та моделі Ізінга. Далі розглядаються існуючі теорії поверхневого натягу ґраткових моделей. Так, у двовимірному випадку звертається увага на точний розв'язок Онзагера, а у тривимірному – наближений вираз Вудбарі, який в загальному випадку справедливий для будь-якої розмірності. В подальшому, авторка застосовує проєктивні перетворення у двовимірному випадку та порівнює результати з відомими машинними розв'язками інтегральних рівнянь. Заключна частина розділу присвячена спробі використати проєктивні перетворення до відомої температурної залежності коефіцієнта поверхневого натягу від температури ґраткового газу, але разом з цим продемонстровано, що для тривимірних флюїдів не вдається таким чином просто знерозмірити залежність, щоб вона приймала універсальний вигляд.

Четвертий розділ присвячено розробці аналітичного виразу для коефіцієнта поверхневого натягу тривимірного ґраткового газу, що базується на виразі Вудбарі. Точний розв'язок Онзагера використовується для перевірки коректності модифікацій, які одночасно задовільняють правильній критичній асимптотиці. Таким чином, вводиться поняття ефективної товщини поверхні і показано, що її фізичний зміст пов'язаний з радіусом кореляції. Тут авторка наводить міркування про можливість прогнозувати потрібну точку речовини через те, що у безрозмірному вигляді значення ефективної товщини у цьому випадку не буде перевищувати 2. В подальшому, описано алгоритм розрахунку параметрів, необхідних для застосування модифікованого виразу Вудбарі та проведено порівняння теорії, як з модельним флюїдом Леннард-Джонса, так і з відомими простими флюїдами. В цілому, продемонстровано результати, що вказують на можливість застосування проєктивних перетворень для теоретичного визначення коефіцієнта поверхневого натягу різних модельних та реальних рідин.

Зауваження та питання до дисертації.

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

1. Треба звернути увагу на певні несуттєві для теорії, але все ж таки помітні, технічні моменти: ефективна товщина перехідного шару між рідиною та парою в тексті називається по різному (інколи це товщина поверхні, а іноді – ширина поверхні, навіть в межах одного абзацу); в дисертації можна знайти щонайменше три різні позначення коефіцієнта поверхневого натягу ґраткового газу, що відрізняються індексами – “latt”, “LG”, “Is”. Хотілося б порадити авторці більш відповідально ставитись до термінології та ретельніше підходити до планування системи фізичних позначень у своїх подальших наукових працях.

2. У дисертації декілька разів згадується принцип відповідних станів і визначаються загальні параметри знерозмірювання разом з ефективною товщиною межі розділу фаз для досить великої кількості різних реальних речовин (майже 40-а). Разом з тим, відомо, що цей принцип є дуже наближеним і застосовним, по суті, лише для речовин, що мають належати певному класу, а відхилення приведених термодинамічних параметрів в цьому законі для речовин різних класів можуть сягати 200%. Нічого дивного, що спроби авторки знайти вищезазначені загальні характеристики призвели до досить наближених і грубих оцінок (див. Рис. 3.9, 3.10, 4.5, 4.27 тощо). Я порадив би авторці в подальшому проводити подібні узагальнення окремо по різних класах: скажімо, окремо для інертних газів, окремо для полярних рідин, і тим більш, окремо для таких речовин як гелій та водень, в яких суттєвими є квантові ефекти (принципову відмінність їхньої поведінки можна наочно побачити на всіх зазначених рисунках та у відповідних таблицях).

3. В якості вихідної моделі для визначення коефіцієнта поверхневого натягу Леннард-Джонсовських рідин на основі ізоморфізму в роботі береться тільки найпростіша ґраткова модель зі сталою взаємодією лише найближчих сусідів (4-х для двовимірних ґраток та 6-ти для тривимірних), але насправді існує велика кількість інших статистичних моделей речовини, як континуальних, так і ґраткових, що відрізняються параметрами геометрії та взаємодії. У зв'язку з цим, виникає питання, чи розглядалися авторкою альтернативні вихідні моделі?

4. У продовження попереднього питання, хотілося б порадити використання в подальшому подібного підходу і до інших моделей речовин крім Леннард-Джонсовських рідин. Я маю на увазі, наприклад, визначення на основі ізоморфізму з простими ґратковими моделями термодинамічних характеристик більш складних (й, можливо, більш реалістичних) ґраткових моделей рідини, або моделей магнетиків, сумішей тощо.

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

Загальний висновок. Враховуючи все вище сказане, а також беручи до уваги актуальність, новизну та обґрунтованість отриманих автором наукових результатів, вважаю, що 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 авторка, Маслечко Анастасія Миколаївна, заслуговує на присудження їй ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 фізика та астрономія.

Офіційний опонент:

зав. кафедри фізики та математики

Національного університету

кораблебудування імені адмірала Макарова,

доктор фізико-математичних наук,

професор,



Ушкац М. В.

