Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003763

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-09-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Добуш Оксана Андріївна

2. Dobush Oksana

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 18-09-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.156.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 27.35.47, 29.17.01

Тема дисертації:

1. Рівняння стану коміркової моделі плину

2. Equation of state of a cell fluid model

Реферат/анотація:

1. У дисертаційній роботі розвинуто метод опису фазового переходу першого роду в однокомпонентних системах у формалізмі великого канонічного ансамблю. Розрахунки виконувались із використанням коміркової моделі плину, яка є узагальнена в другому розділі дисертації на випадок неперервних систем. Суть моделі коміркового плину полягає в умовному поділі загального об'єму системи на певне число фіксованих за розміром комірок. У залежності від густини системи, в кожну з комірок потрапляє певна кількість частинок, причому не накладається жодних умов на їхнє число. Частинки, які перебувають в межах однієї комірки, вважаються такими, що відштовхуються між собою, а частинки із різних комірок – притягуються. В якості потенціалу взаємодії в роботі використовується, зокрема, взаємодія Кюрі-Вейса. Особливістю такого типу взаємодії є відсутність залежності від віддалі. На основі методу опису фазової поведінки, запропонованого у дисертаційній роботі, вперше здійснено точний розрахунок великої статистичної суми неперервної системи із взаємодією Кюрі-Вейса, отримано рівняння стану такої системи, встановлено існування в ній каскаду фазових переходів першого роду із фаз з меншою густиною до фаз із

щораз більшою густиною. Досліджено залежність значення критичної температури залежно від значень параметра a, який характеризує відношення відштовхувальної частини взаємодії до притягальної. Встановлена закономірність зменшення значення критичної температури із зменшенням величини притягання відносно відштовхування. Отримані вище результати використано для опису фазової поведінки систем із взаємодією, що залежить від віддалі. Для цього здійснено розрахунок великої статистичної суми коміркової моделі плину із потенціалом взаємодії Морзе. Існування для нього Фур'є-образу дозволило застосовувати метод колективних змінних. Особливість розрахунку великої статистичної суми коміркової моделі плину полягає у введені своєрідної системи відліку. Вона містить лише частину відштовхувальної компоненти потенціалу взаємодії, а також дозволяє здійснити розрахунок якобіана переходу від густинних до колективних змінних. У роботі розвинуто два підходи до дослідження фазової поведінки моделі. Перший спосіб є загальним і не залежить від форми потенціалу взаємодії. Він є більш громіздким, оскільки одним із його етапів є проміжне інтегрування під час розрахунку якобіана переходу. Другий спосіб — прямий — застосовний для обмеженого класу потенціалів взаємодії. Він використовується лише тоді, коли ефективний потенціал взаємодії, що утворюється внаслідок формування системи відліку із початкового потенціалу, не змінює знаку. Такий підхід дав можливість отримати точне представлення великої статистичної суми системи з потенціалом Морзе у вигляді безмежного кумулянтного ряду. Встановлено, що значення кумулянтів виражаються через нові спеціальні функції, які є швидкозбіжними рядами. Характерною особливістю застосування великого канонічного розподілу є отримання рівняння на зв'язок хімічного потенціалу та густини. У роботі отримано термодинамічний потенціал моделі в наближенні молекулярного поля, на основі якого розраховані основні характеристики фазового переходу першого роду. Знайдено значення параметрів критичної точки, розраховано рівняння стану в широкому діапазоні густини і температури вище і нижче критичної точки, на основі якого побудовано криву співіснування та спінодаль. Розраховано також вигляд термодинамічного потенціалу із врахуванням флуктуацій, справедливого поблизу критичної точки. Основна ідея розрахунку термодинамічного потенціалу поблизу Tc полягає в окремому розрахунку внесків від короткохвильових та довгохвильових режимів флуктуацій параметрів порядку. Короткохвильові моди характеризуються наявністю ренормгрупової симетрії і описуються негауссовою густиною мір. У цьому випадку використовується метод ренормалізаційної групи. У дисертації розвинуто прямий метод обчислення термодинамічного потенціалу, що включає обидва типи мод флуктуацій (довгохвильові та короткохвильові) у надкритичній області. Отримано та досліджено нелінійне рівняння, що зв'язує густину та хімічний потенціал. Вирази для коефіцієнтів цього рівняння представлені як функції відношення ефективного хімічного потенціалу до ренормалізованої температури. У роботі отримано координати критичної точки, розраховано рівняння стану та ізотермічну стисливість в надкритичній області. Встановлено наявність максимумів на ізотермах стисливості як функції густини. Побудовано проекцію кривої, що відповідає цим максимумам, на площину тиск-температура. В області температур близьких до критичної таку криву ототожнюють із лінією Відома, яка є границею розділу газоподібної та рідиноподібної структур надкритичного плину. На основі запропонованої у дисертаційній роботі моделі розвинуто теоретичний метод, який дає можливість в єдиному підході здійснити опис фазової поведінки простих однокомпонентних систем як у широкому діапазоні густини і температури, так і в критичній області.

2. The thesis is devoted to the development of a method for describing the first order phase transition in one-component systems in the framework of the grand canonical ensemble. The calculations were performed using a cell fluid model, which is generalized in the thesis to the case of continuous systems. The idea of the cell fluid model consists in the conditional partition of the total volume of the system into a certain number of fixed size cells. Depending on the density of the system, each of the cells contains a certain amount of particles, without imposing any conditions on their number. The particles within one cell consider to repel each other and particles from different cells – to attract each other. The Curie-Weiss interaction, which fails to be a function of distance between constituents, is used as the interaction potential. Based on the method of describing the phase behavior proposed in the thesis, for the first time an accurate calculation of the grand partition function of a continuous system with Curie-Weiss interaction is performed, the equation of state of such a system is obtained, the cascade

of phase transitions from the phase of lower density to the phase of increasingly higher density is detected. The regularity of decrease in the value of the critical temperature with decrease in the value of attraction relative to repulsion is established. The above results are used to describe the phase behavior of systems with distance dependent interaction. For this purpose, the grand partition function of a cell fluid model with the Morse interaction potential is being calculated. The Morse potential has a Fourier transform, which allows applying the method of collective variables. The peculiarity of calculating the grand partition function of the cell fluid model is the introduction of a kind of a reference system. The later contains only a part of the repulsive component of the interaction potential and also allows calculating the Jacobian of transition to collective variables. Two approaches to the study of the phase behavior of the model are developed. The first method is common and does not depend on the form of the interaction potential. However, it is more cumbersome, since one of its stages is intermediate integration during the calculation of the Jacobian of transition. The second method — direct — is applicable to a limited class of interaction potentials. It is used only when the effective interaction potential resulting from the formation of the reference system potential from the initial potential does not change the sign. This approach made it possible to obtain an accurate representation of the grand partition function of a system with Morse potential in the form of an infinite cumulant series. It is established that the values of cumulants are expressed through new special functions, which are rapidly convergent series. A characteristic feature of using a grand canonical distribution is to obtain an equation for the bond of chemical potential and density. The thermodynamic potential of the model is obtained, based on which the main characteristics of the first order phase transition are calculated. The values of the critical point parameters were found, the equation of state was calculated over a wide range of density and temperature above and below the critical point, based on which the coexistence curve and spinodal were plotted. The thermodynamic potential in the vicinity of the critical point is also calculated with allowance for fluctuations. The basic idea of calculating the thermodynamic potential near Tc is to include the contributions from short- and long-wave modes of order parameter fluctuations. Shortwave modes are characterized by the presence of renormalization group symmetry and are described by non-Gaussian measure density. In this case, the method of renormalization group is used. The direct method of calculating thermodynamic potential is developed in the thesis, which includes both types of modes of fluctuations (long-wave and shortwave) in the supercritical region. A nonlinear equation relating the density and the chemical potential is obtained and investigated. The coordinates of the critical point are obtained, the equation of state and the isothermal compressibility in the supercritical region are calculated. The existence of maxima on compressibility isotherms as functions of density is established. The projection of a curve corresponding to these maxima is plotted on the pressure-temperature plane. Near the critical temperature, such a curve is identified as the Widom line. The latter is a boundary between the gaseous and liquid structures of the supercritical fluid. Based on the model proposed in the thesis, the theoretical method is developed, which makes it possible in frames of the single approach to describe the phase behavior of simple one-component systems both in wide range of density and temperature, and in the critical region.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Козловський Михайло Павлович

2. Kozlovskii Mykhailo Pavlovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ваврух Маркіян Васильович

2. Vavrukh Markiyan V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костробій Петро Петрович

2. Kostrobii Petro P.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Булавін Леонід Анатолійович

2. Bulavin Leonid A.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.16

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Мриглод Ігор Миронович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Мриглод Ігор Миронович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.