Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000582

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-01-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Катц Андрій Михайлович

2. Andriy Katts

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: фізика та астрономія

Дата захисту: 29-12-2023

Спеціальність за освітою: фізика

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 22.104.2023/ ID 2793

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.17

Тема дисертації:

1. Глобальний ізоморфізм Юкавівських флюїдів та моделі Ізінга.

2. Global isomorphism between Yukawa fluids and the Ising model.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню рівноваги рідина-пара флюїдів із міжчастинковою взаємодією притягнення юкавівського типу +жорстке ядро, т.з. HCAYF (та його узагальнень) у розмірностях 2 та 3 наоснові підходу т.з. Глобального Ізоморфізму. Останній грунтується на припущенні про взаємооднозначну відповідність між станами граткового газу(дискретна модель, що точно ізоморфна до моделі Ізінга) та молекулярного флюїду. Така відповідність, при умові виконння закону прямолінійного діаметра, може бути формалізована у вигляді однопараметричного проективного перетворення у площині густина-температура. Ми поширюємо на HCAYF цей підхід, який раніше було застосовано до флюїдних систем з леннард-джонсівським типом взаємодії. Зокрема, у попередніх роботах було показано, що параметр проективного перетворення може бути знайдений, спираючись на однорідність притягувальної частини потенціалу, та знайдено, що у випадку 3? ? = 1/2 і ? = 1/3 у 2?. Фактично, стале значення цього параметру дало змогу розширити принцип відповідних станів та встановити ширший клас термодинамічної

подібності, ніж той, що встановлює рівняння ван-дер-Ваальса. Також це дало змогу передбачити безрозмірні значення критичної температури, густини та тиску для систем із вказаним типом взаємодії. Окрім цього, були описані температурні залежності коефіцієнту поверхневого натягу, спираючись на можливість встановити відповідність між флюїдом та дискретною моделлю. Ідея узагальнення принципу відповідних станів, але без обговорення зв'язку з моделлю граткового газу, раніше висувалась Філіпповим та була розвинута у роботах Апфельбаума та Воробйова на основі концепції трикутника рідинно-газових станів. При відповідному нормуванні бінодальні дані для широкого набору реальних та модельних систем можна вписати у єдиний трикутник. Принципова відмінність у підходах полягає у виборі базового елементу і відповідних одиниць нормування. Концепція рідинногазового трикутника у якості нормувальних множників для температури та густини обирає температуру й густину точки Бойля та базується на гіпотезі, що Зено лінія може розглядатись як дотична до продовження рідкої гілки бінодалі за потрійну точку при ? п 0. Щоправда, у недавніх роботах по моделюванню 2? систем автори концепції вказували, що ця лінія не є дотичною до бінодалі. На початку дисертації розглянуто загальні ідеї Глобального ізоморфізму та показано основні співвідношення між термодинамічними функціями флюїду та граткового газу. Далі запропоновано наближення для прямої кореляційної функції та отримано рівняння, що дає можливість визначити параметр проективного перетворення в рамках цього наближення. Показано, що хоча дане рівняння не може бути розв'язане аналітично його, можна спростити використавши наближення ван-дер-Ваальса для другого віріального коефіцієнту. У цьому ж розділі розглянуто квантові поправки до величин, що визначають бінодаль флюїду в рамках підходу глобального ізоморфізму. Визначено, що додавання слабкого притяжіння між частинками, зумовлене квантовою статистикою Бозе-Айнштайна, призводить до збільшення симетрії бінодалі, як і слідує з фізичних міркувань. Дійсно, при розгляді суто квантових систем заміна "частинка-дірка"не має впливати на властивості системи, зокрема цей факт найкраще ілюструє бінодаль граткового газу, що є симетричною відносно прямої ? = 1/2.

2. The dissertation is devoted to the investigation of the equilibrium of a fluid-vapor system with interparticle interaction of Yukawa-type plus Hard core, i.e., HCAYF (and its generalizations) in dimensions 2 and 3, based on the approach of the Global Isomorphism. The latter is grounded on the assumption of a one-to-one correspondence between the states of the lattice gas (a discrete model precisely isomorphic to the Ising model) and a molecular fluid. Such correspondence, under the condition of the law of linear diameter, can be formalized as a one-parameter projective transformation in the density-temperature plane. We extend this approach to HCAYF, which was previously applied to fluid systems with Lennard-Jones-type interactions. In particular, previous works have demonstrated that the parameter of the projective transformation can be found based on the homogeneity of the attractive part of the potential, and it was found that in the case of 3?, ? = 1/2, and ? = 1/3 in 2?. In fact, a constant value of this parameter allowed us to broaden the principle of corresponding states and establish a wider class of thermodynamic similarity than that described by the van der Waals equation. This also enabled the prediction of dimensionless values of critical temperature, density, and pressure for systems with the specified interaction type. Furthermore, temperature dependencies of the surface tension coefficient were described based on the possibility to establish a correspondence between the fluid and the discrete model. The idea of generalizing the principle of corresponding states, without discussing its connection to the lattice gas model, was previously proposed by Philippov and further developed in the works of Apfelbaum and Vorobyov, based on the concept of the liquid-gas state triangle. When appropriately normalized, the binodal data for a wide range of real and model systems can be fitted into a single triangle. The fundamental difference between these approaches lies in the choice of the reference element and the corresponding normalization units. The concept of the liquid-gas state triangle suggests that the values of temperature and density for the Boyle point as characteristic scales. It is based on the hypothesis that the Zeno line can be considered as a tangent to the extension of the liquid branch of the binodal beyond the triple point as T approaches 0. However, recent studies in the modeling of 2D systems have indicated that this line is not tangent to the binodal. First, the dissertation examines the general ideas of Global Isomorphism and shows the main relations between the thermodynamic functions of the fluid and the lattice gas. Next, an approximation of the mean-field type for the direct correlation

function and an equation for the parameter of the projective transformation is proposed. It is shown that although this equation cannot be solved analytically, it can be simplified using the van der Waals approximation for the second virial coefficient. In the same section, quantum corrections to the quantities defining the binodal fluid within the framework of the global isomorphism approach are considered. It was determined that the addition of a weak attraction between particles caused by Bose-Einstein quantum statistics leads to an increase in binodal symmetries, as follows from physical considerations. Indeed, when considering purely quantum systems, the ”particle-hole” replacement should not affect the properties of the system, in particular, this fact is best illustrated by the lattice gas binodal, which is symmetric with respect to the line ? = 1/2.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- A. M. Katts, V. L. Kulinskii, Hard-core attractive Yukawa fluid global isomorphism with the lattice gas model, J. Chem. Phys. 156 (2022) 244104. doi:10.1063/5.0092703.
- A. M. Katts, V. L. Kulinskii, Global isomorphism approach: attractive Yukawa fluid, 2D case, J. Mol. Liq. 388 (2023) p. 122736. doi:10. 1016/j.molliq.2023.122736.
- A. M. Katts, V. L. Kulinskii, The parameters of the Liquid-Gas state triangle for hard core attractive Yukawa fluids, J. Phys. Chem. B 127, 39 (2023) 8468-8475. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.3c04310.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0120U104105

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кулінський Володимир Леонідович

2. Volodymyr Kulinskyi

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гаврюшенко Дмитро Анатолійович
2. Dmytro Gavryushenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університ імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070994

Місцезнаходження: , Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ушкац Михайло Вікторович
2. Michael Ushcats

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0174-1594

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова

Код за ЄДРПОУ: 02066753

Місцезнаходження: проспект Героїв України, буд. 9, Миколаїв, Миколаївський р-н., 54007, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маломуж Микола Петрович

2. Mykola Malomuzh

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сушко Мирослав Ярославович

2. Miroslav Sushko

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:
;https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55943901800;https://orcid.org/0000-0003-4205-4771

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Гоцульський Володимир Якович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Гоцульський Володимир Якович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Лукашук Світлана Борисівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна