Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U001068

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-03-2025

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маслечко Анастасія Миколаївна
2. Anastasiia Maslechko

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: 03-06-2025

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): PhD 8204

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: 29.17.19.05, 29.17, 29.17.19, 29.19.03

Тема дисертації:

1. Поверхневий натяг молекулярних рідин у рамках підходу глобального ізоморфізму.

2. Surface tension of molecular fluids using global isomorphism approach.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена спробі аналітично просто визначити температурну залежність поверхневого натягу на межі «рідина – пар» за допомогою підходу ізоморфізму з гратковим газом. Поверхневий натяг є найбільш яскравою властивістю рідини внаслідок просторової неоднорідності межі розділу фаз. Теоретичний опис такої ситуації є значно складнішим ще й через відсутність просторової симетрії. Підхід глобального ізоморфізму раніше був запропонований Кулінським для опису об'ємних характеристик фаз, зокрема, ним була відтворена бінодаль у координатах (?, ?) для широкої множини речовин, а також модельного флюїду з потенціалом взаємодії Леннарда-Джонса. Перевірка валідності і взагалі меж застосування перетворень глобального ізоморфізму до поверхневого натягу є однією із основних задач цієї роботи. Ця задача розв'язується з використанням даних як для модельних так і для реальних флюїдів. Пропонується використовувати термін «глобальних ізоморфізм», щоб підкреслити відмінність від відомого критичного ізоморфізму. Основною метою підходу є встановлення значень термодинамічних величин на всьому інтервалі температур співіснування рідинної і газоподібної фази, де існує і поверхневий

натяг на межі рідина-пар. Також можна встановити ту множину речовин, для яких перетворення будуть мати універсальний характер, а отже і глобальний. Взагалі результати для поверхневого натягу є часто також індикатором адекватності рівняння стану, тому власне аналіз положень глобального ізоморфізму на прикладі поверхневого натягу може наблизити нас до нового рівняння стану. Відомий принцип відповідних станів (ПВС) ван дер Ваальса, вдосконалений у свій час Гуггенгеймом, відіграє важливу роль у формулюванні основних положень ізоморфізму з гратковими моделями. Це насамперед експериментальний закон («майже») прямолінійного діаметру та існування зено-елемента, дотичної до бінодалі у координатах (?, ?) прямої, що визначає одиничний фактор об'ємної стисливості. Дуже наочно ці емпіричні закономірності поєднуються у вигляді концепції трикутника рідинногазового стану, розглянутого Апфельбаумом. Модель Ізінга вперше знаходить свою корисність при опису фазового переходу для намагніченості, точний розв'язок Онсагера у двовимірному випадку дає в нашому випадку при описі системи «рідина - пар» отримати температурну залежність коефіцієнта поверхневого натягу в двовимірному просторі. В даній роботі спочатку наведені методи кількісного опису поверхневого натягу та проблеми з цим пов'язані. Окрім експериментальних підходів наводиться еволюція уявлень про правильний опис коефіцієнта поверхневого натягу, який пізніше, ніж подібний йому тиск, отримав опис через міжмолекулярну взаємодію. За історичну точку відліку береться підхід Лапласа та теорія ван дер Ваальса, а точка розгалуження з методами сьогодення для нашої теорії лежить у підході Кірквуда-Бафа та Тріценберга-Цванціга. Сучасні методи багато в чому покладаються на машинну потужність, тобто фактично зводяться до різноманітних наближень для чисельного обчислення коефіцієнта поверхневого натягу зі складних інтегральних та диференціальних рівнянь. Ми ж будемо використовувати ізоморфізм з гратковим газом. Відповідно задача полягає в тому, щоб визначити аналітичний вираздля коефіцієнта поверхневого натягу граткового газу, його керуючі параметри та застосувати перетворення ГІ для них.

2. The dissertation work is devoted to an attempt to analytically determine the temperature dependence of the surface tension at the "liquid – vapor" interface using the isomorphism approach with a lattice gas. Surface tension is the most striking property of a liquid because of the spatial heterogeneity of the phase interface. The theoretical description of such a situation is also much more complicated because of the lack of spatial symmetry. The global isomorphism (GI) approach was previously proposed by Kulinsky to describe the volumetric characteristics of phases; in particular, it reproduced the binodal in the coordinates (?, ?) for a wide set of substances, as well as a model fluid with the Lennard-Jones interaction potential. Verification of the validity and, in general, the limits of application of global isomorphism transformations to surface tension is one of the main tasks of this work. This task is solved using data for both model and real fluids. It is proposed to use the term "global isomorphism" to emphasize the difference from the known critical isomorphism. The main goal of the approach is to establish the values of thermodynamic quantities over the entire temperature range of coexistence of the liquid and gaseous phases, where there is also surface tension at the liquid-vapor interface. It is also possible to establish the set of substances for which the transformations will be universal in nature, and therefore global. In general, the results for surface tension are often also an indicator of the adequacy of the equation of state, so the analysis of the provisions of global isomorphism on the example of surface tension can bring us closer to a new equation of state. The well-known principle of corresponding states (PCS) of van der Waals, improved in his time by Guggenheim, plays an important role in the formulation of the basic principles of isomorphism with lattice models. This is primarily the experimental law of ("almost") rectilinear diameter and the existence of a zeno-element, tangent to the binodality in the coordinates (?, ?) line, which determines the unit factor of volumetric compressibility. These empirical laws are very clearly combined in the form of the concept of the triangle of the liquid-gas state, considered by Apfelbaum. The Ising model first finds its usefulness in describing the phase transition for magnetization, the exact solution of Onsager in the two-dimensional case allows us to obtain the temperature dependence of the surface tension coefficient for two-dimensional space in our case when describing the system "liquid - vapor". In this work, we first present methods for quantitatively describing surface tension and the problems associated with it. In addition to experimental approaches, we present the evolution of ideas about the correct description of the surface tension coefficient through intermolecular interactions, which was described

later than the similar to it parameter – the pressure. The historical starting point is taken as the Laplace approach and the van der Waals theory, and the branching point with the present-day methods for our theory lies in the Kirkwood-Buff and Trizenberg-Zwanzig approaches. Modern methods rely heavily on machine power, that is, they actually reduce to various approximations for the numerical calculation of the surface tension coefficient from complex integral and differential equations. We will use isomorphism with a lattice gas. Accordingly, the task is to determine the analytical expression for the surface tension coefficient of a lattice gas, itscontrol parameters, and apply the GI transformations for them.

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:

- Maslechko A. Surface tension of the liquid–vapor interface of the Lennard-Jones fluids from the Ising model / V. L. Kulinskii, A. Maslechko // Journal of Physical Chemistry C. – 2016. – Vol. 120, iss. 16. – P. 8790–8803.
- Maslechko A. Surface tension of molecular liquids: Lattice gas approach / A. Maslechko, K. Glavatskiy, V. L. Kulinskii // Journal of Molecular Liquids. – 2017. – Vol. 235. – P. 119–125.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0120U104105 0122U000687

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 університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, 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. Mykhailo Ushkats

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. Черненко Олександр Сергійович

2. Chernenko Oleksandr S.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., доц., 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. Гоцульський Володимир Якович

2. Hotsulskyi Volodymyr Ya.

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:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Маломуж Микола Петрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Маломуж Микола Петрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Лукашук Світлана Борисівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Тетяна Анатоліївна