Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000289

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-01-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гордійчук Володимир Вікторович
2. Hordiichuk Volodymyr V.

Кваліфікація:

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: 48232 Освітньо-науковапрограма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем НАНУкраїни (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 04-03-2024

Спеціальність за освітою: 104 Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.156.006 ID 4807

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.17, 29.17.19, 29.03.77

Тема дисертації:

1. Базисна система в теорії плинів: від пружних сфер до м'яких сфер з короткосяжним притяганням

2. Reference system in the theory of fluids: from hard spheres to soft spheres with a short-range attraction

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці реалістичної базисної системи, яка допускає теоретичне трактування включно з можливістю аналітичного опису, з метою використання в методі теорії збурень для побудови мікроскопічної молекулярної теорії простих, неасоціативних плинів у широкому діапазоні термодинамічних параметрів. Наявність такої теорії для плинів є однією із найголовніших цілей прикладної молекулярної фізики. Теорія Ван дер Ваальса (vdW) вперше задекларувала, що рівняння стану простого плину містить два внески - один від виключеного об'єму, а другий від енергії далекосяжного притягання. Для ілюстрації своєї теорії Ван дер Ваальс використав найпростішу модель, яка задовольняла умові існування виключеного об'єму - систему пружних сфер (HS) і використав для її опису найпростіше рівняння стану. Тільки приблизно через півтора століття стало зрозуміло, що теорія vdW має строге статистико-механічне

обгрунтування як перше наближення термодинамічної теорії збурень Цванціга. Базисна система HS у теорії збурень Цванціга і доданок виключеного об'єму в рівнянні стану vdW були ототожнені. Точність теорії збурень суттєво погіршується щоразу, коли ця подібність втрачається. Типовими умовами, коли це відбувається, є малі густини і низькі температури. На даний час стало зрозумілим, що сновним джерелом цих проблем є базисна система з короткосяжним відштовхуванням та модель пружних сфер, яка використовується для її опису. На противагу до термодинамічних властивостей, динамічні властивості плину пружних сфер, зокрема, поперечна колективна динаміка є значно менше дослідженими. Тому в дисертаційній роботі було проведено молекулярно-динамічне (MD) дослідження колективних збуджень у плині пружних сфер у широкому дапазоні густин. Окрім обмежень, які плин пружних сфер, будучи використовуваним як базисна система, накладає на термодинамічні властивоості досліджуваної системи, було також виявлено суттєві відмінності у колективній динаміці такого плину у порівнянні з плином м'яких сфер. Дуже специфічною особливістю твердосферних плинів є зростання співвідношення питомих теплоємностей зі збільшенням густини, що відображає посилення зв'язку між в'язкими та тепловими процесами, продукуючи сильніший вплив теплових флуктуацій на дисперсію поздовжніх колективних збуджень. Навпаки, прості рідини і, відповідно, базисна система з м'яким відштовхуванням мають відношення питомих теплоємностей, що зменшується зі збільшенням густини системи. Поряд з цим, для всіх досліджуваних густин ми отримали дисперсію поздовжніх колективних збуджень без типової для плинів з м'яким короткосяжним відштовхуванням «позитивної звукової дисперсії». Навпаки, спостерігалося негативне відхилення від лінійного гідродинамічного закону дисперсії, що можна пояснити сильним внеском теплових флуктуацій. У роботі запропоновано оригінальну функціональну форму парного потенціалу базисної системи з короткосяжним відштовхуванням типу Вікса-Чандлера-Андерсена (WCA), яке на умовах неперервності доповнено швидко загасаючим короткосяжним притяганням у вигляді суми двох експонент Юкави (Y). У якості критерію короткосяжності використано радіус першої координаційної сфери (FCS), значення якого оцінено і знайдено з положення першого мінімуму RDF плину Ленарда-Джонса (LJ) для випадку значень густини і температури у типовій рідкій фазі. Запропонована базисна систем з короткосяжним притяганням досліджена на предмет існування фазового переходу пара-рідина. Отримане значення 0.55 безрозмірної критичної температури базисної системи знаходиться нижче від безрозмірної трикритичної температури 0.661 плину LJ, що є важливою необхідною передумовою до базисної системи класу простих плинів в цілому. Показано, що RDF базисної системи з короткосяжним притяганням найкраще з усіх інших моделей базисної системи відтворює FCS плину LJ в широкому діапазоні термодинамічних станів, включно з діапазоном малих густин та низьких температур. Розраховано три перших віріальних коефіцієнти базисної системи з короткосяжним притяганням і показано їх якісну подібність до відповідних віріальних коефіцієнтів вихідного плину LJ.Порівняння отриманих результатів для фактора стисливості ілюструє, що включення до базисної системи всіх взаємодій в радіусі FCS, дозволяє отримати результат досить добре наближений до його значення для вихідного плину LJ. Виходячи з умови рівності температур Бойля, сформульовано критерій для співставлення системи твердих сфер з притяганням Юкави у відповідність до розробленої у дисертаційній роботі базисної системи з короткосяжним притяганням. Розглянуто можливість використання цього критерію з метою побудови аналітичного опису термодинамічних властивостей запропонованої базисної системи з короткосяжним притяганням, скориставшись вже існуючими в літературі аналітичними результатами в рамках середньосферичного наближення (MSA) для системи твердих сфер з притяганням Юкави.

2. The dissertation work is devoted to the development of a realistic reference system, which allows theoretical interpretation, including the possibility of analytical description, with the aim of using in the perturbation theory approach to build a microscopic molecular theory of simple, non-associative fluids in a wide range of thermodynamic parameters. The availability of such a theory for fluids is one of the main goals of applied molecular physics. Van der Waals (vdW) theory first declared that the equation of state of a simple substance contains two contributions - from the excluded volume and from the energy of attractive forces. To illustrate his theory, van der Waals used the simplest model of a molecule that satisfied the condition of the existence of an

excluded volume - a hard sphere, and used the simplest equation of state for this model. Only about a century and a half later it became clear that the vdW theory has a rigorous statistical-mechanical justification as a first approximation of the thermodynamic perturbation theory. The reference system of hard spheres in the Zwanzig perturbation theory and the excluded volume term in the vdW equation of state were identified. Typical conditions where this occurs are low density and temperature, or conditions around the critical point vicinity. The main source of these problems is the reference system with short-range repulsion and the hard sphere model used to describe it analytically. In contrast to the thermodynamic properties, the dynamic properties of the hard-sphere fluids, the high-frequency transverse dynamics, are much less studied. Therefore, an MD study of the hard-sphere fluids in a wide range of densities was carried out. In addition to the limitations that the hard-sphere fluid, being used as a reference system, imposes on the thermodynamic properties of the studied system, significant differences in the collective dynamics of such a fluid in comparison with the fluid of soft spheres were also found. A very specific feature of hard-sphere fluids is the growth of the ratio of specific heat capacities with increasing density, which reflects the strengthening of the connection between viscous and thermal processes, producing a stronger influence of thermal fluctuations on the dispersion of longitudinal collective excitations. On the contrary, simple fluids and, accordingly, the reference system with soft repulsion have a ratio of specific heats that decreases with increasing system density. Along with this, for all values of the packing fraction, we obtained the dispersion of the longitudinal collective excitations without the "positive sound dispersion" typical of a liquid with soft short-range repulsion. On the contrary, a negative deviation from the linear hydrodynamic law of dispersion was observed, which can be explained by a strong contribution of thermal fluctuations. An original functional form of the pair potential of the reference system with WCA-like short-range repulsion is proposed, which, under continuity conditions, is supplemented by a rapidly decaying short-range attraction in the form of the sum of two Yukawa exponents. As a short-range criterion, the FCS radius was used, the value of which was estimated from the position of the first minimum of the radial distribution function (RDF) of the LJ fluid in a typical liquid phase. The reference system with short-range attraction was investigated for the existence of a vapor-liquid phase transition. The obtained value of 0.55 of the dimensionless critical temperature of the reference system is lower than the dimensionless tricritical temperature of 0.661 of the LJ fluid, which is an important prerequisite for the reference system of the class of simple flows in general. It is shown that the RDF of the reference system with short-range attraction better than all other models of the reference system reproduces the FCS of the LJ fluid in a wide range of thermodynamic states, including the range of low densities and low temperatures. The first three virial coefficients of the reference system with short-range attraction are calculated and their qualitative similarity to the corresponding virial coefficients of the LJ fluid is shown. A comparison of the obtained results for the compressibility factor, illustrates that the inclusion of interactions acting within the FCS into the reference system allows obtaining a result sufficiently close to its value for the initial LJ fluid. Based on Boyle temperature equality, a criterion is formulated for comparing the system of hard spheres with Yukawa attraction to the proposed reference system with short-range attraction. The possibility of using this criterion in order to derive an analytical description of the thermodynamic properties of the proposed reference system with short-range attraction was considered, using the results already available in the literature for the system of hard spheres with Yukava attraction.

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: Не застосовується

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Non-hydrodynamic transverse collective excitations in hard-sphere fluids. / V. Hordiichuk, T. Bryk, A. Huerta, and A. Trokhymchuk // The Journal of Chemical Physics. 2017. Vol. 147. P.064509. https://doi.org/10.1063/1.4997640
- Structure and thermodynamics of a short-range Lennard-Jones fluid reference / Hordiichuk V., Skvara J., Trokhymchuk A., and Nezbeda I. // Journal of Molecular Liquids. 2023. Vol. 386. P. 122483. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122483

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: №0112U007762, №0118U003011, №0120U100202

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Трохимчук Андрій Дмитрович

2. Andrii Trokhymchuk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2257-0779

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Плевачук Юрій Олександрович

2. Yurii O. Plevachuk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8472-6447

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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. Баумкетнер Андрій Богданович

2. Andrii B. Baumketner

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2726-931X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ігнатюк Василь Васильович

2. Ignatyuk Vasyl V.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Держко Олег Володимирович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Держко Олег Володимирович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Гордійчук Володимир Вікторович
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

