

Відгук офіційного опонента

на дисертаційну роботу Бистренка Олексія Васильовича “Формування упорядкованих структур в конденсованих системах”, подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

У дисертаційній роботі О.В. Бистренка розглядається проблема формування впорядкованих структур із характерними просторовими масштабами порядку 100 нм - 100 мкм у конденсованих середовищах. Прикладами систем, у яких можливе спонтанне формування таких нано- та мікроструктур, що досліджувались у роботі, є заряджені кулонівські кристали та евтектичні суміші. Фізичні процеси, які лежать в основі формування впорядкованих структур та пов'язані з ними явища зачіпають ряд суміжних областей фундаментальної та прикладної науки. Так, розуміння закономірностей нелінійного екранування заряджених макрочастинок у рівноважному середовищі, особливостей екранування в нерівноважній плазмі з урахуванням її дискретної природи та протікання струмів веде до пояснення фундаментальних властивостей і структури кулонівських кристалів у різних умовах, поведінки заряджених колоїдів, лабораторної та космічної запорошеної плазми. З практичної точки зору вивчення цих питань необхідне для вдосконалення плазмових технологій обробки матеріалів, зокрема, щавлення мікросхем. Формування впорядкованих структур в евтектичних сумішах визначається кінетичними процесами на міжфазних границях. Аналіз таких контактних явищ на основі застосування числових методів дає змогу визначити структурні характеристики керамічних матеріалів та запропонувати рекомендації щодо поліпшення технології їх спікання. Тому числове моделювання фізичних процесів, що лежать в основі формування впорядкованих мікроструктур у досліджених у дисертації системах та пов'язаних із ними явищ є актуальною задачею фізики конденсованого стану. Це підтверджується також значною кількістю проектів та міжнародних грантів, у рамках яких виконувалося дане дослідження.

Основна частина дисертації складається зі вступу, семи розділів та висновків.

У вступі обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету і задачі дослідження, визначено наукову новизну та значення отриманих результатів подано інформацію про структуру та обсяг дисертації. Подано інформацію про публікації та апробацію результатів на конференціях, окреслено особистий внесок автора до публікацій.

Перший розділ є оглядовим, у ньому описані основні методи комп'ютерної фізики, які застосовувались в дисертаційній роботі.

У розділах 2-7 викладено результати оригінальних досліджень.

Було розроблено алгоритми для обчислення кулонівської енергії в нескінченних планарних системах, розглянуто структуру сильнозв'язаної (неідеальної) плазми в квазідвовимірній геометрії, вивчено структурні фазові переходи в планарних кулонівських системах (розділ 2).

Атомістичними методами перевірено застосовність теорії Пуассона - Больцмана в області нелінійності, вивчено властивості та вплив нелінійних ефектів на криву плавлення заряджених колоїдних систем. Для опису екранування макрочарядів в нерівноважному слабоіонізованому газі застосовано дифузійно-дрейфове наближення та броунівську динаміку. На основі такого підходу вивчені асимптотичні характеристики ефективного потенціалу макрочастинок в умовах їхнього заряджання плазмовими струмами. Шляхом моделювання на основі броунівської динаміки

розглянуті статистичні властивості флуктуацій заряду макрочастинок (розділи 3-4).

Вивчення властивостей замагніченої нерівноважної плазми ґрунтувалося на узагальнених рівняннях броунівської динаміки, що враховують сили Лоренца. В результаті такого моделювання передбачено явище спонтанного формування вихрових структур у планарній нерівноважній плазмі в присутності магнітного поля (розділ 5).

Закономірності утворення структур в евтектичних системах розглядалися на основі теорії фазових полів та методом молекулярної динаміки. Були змодельовані процеси утворення волокнистих упорядкованих структур при спрямованій кристалізації борид-боридної кераміки, вивчено структурні та транспортні властивості міжфазних інтерфейсів у бінарних евтектиках, досліджено контактні явища, зокрема, властивості контактної дифузійної зони (розділ 6).

Для вивчення структурних перетворень при деформації та руйнуванні кристалів запропоновано метод, в основі якого лежить аналіз топології мережі хімічних зв'язків. Ефективність методу проілюстрована на прикладі руйнування ікосаедричного карбиду бору під навантаженням (розділ 7).

У Висновках сформульовані основні наукові положення, встановлені в результаті виконання дисертаційної роботи.

За науковою новизною теоретичні результати, отримані у дисертаційній роботі, є суттєвим внеском до фізики конденсованого стану. На мій погляд, варто в першу чергу відзначити такі результати:

- Вперше методом Монте-Карло на основі багаточастинкової моделі досліджена застосовність теорії Пуассона - Больцмана в області нелінійності, вивчено вплив нелінійних ефектів на екранування макрочарядів і зарядової асиметрії на кристалізацію кулонівських структур у заряджених колоїдах. Встановлені обмеження на константи зв'язку та зарядову асиметрію, що визначають можливість утворення кристалічної фази.
- Вперше в рамках дифузійно-дрейфової моделі та методом броунівської динаміки досліджено характер асимптотики ефективного екранованого поля макрочастинок в слабоіонізованому газі. Показано, що за розташування джерел плазми на нескінченності асимптотика має кулонівський характер, а ефект екранування проявляється у зменшенні ефективного заряду. За рівномірного розподілу джерел плазми по об'єму екранування має експоненціальний характер, причому радіус екранування у цьому випадку набагато перевищує довжину Дебая.
- Вперше на основі моделювання методом броунівської динаміки підтверджено справедливність узагальнення гіпотези Онзагера щодо релаксації флуктуацій на випадок нерівноважної стаціонарної системи – макрочастинок, заряд якої підтримується плазовими струмами.
- Вперше атомістичним методом у рамках моделювання на базі броунівської динаміки описано процес самоорганізації у відкритій нерівноважній системі – замагніченій двокомпонентній плазмі з урахуванням процесів генерації та рекомбінації зарядів. У числових експериментах передбачено можливість спонтанного формування вихрових структур, що супроводжується просторовим розділенням компонент.

Обґрунтованість отриманих у дисертаційній роботі результатів забезпечена застосуванням реалістичних, добре випробуваних моделей, використанням сучасних методів комп'ютерної фізики та надійного програмного забезпечення. Достовірність основних положень, висновків і рекомендацій забезпечена їхньою узгодженістю з

відомими експериментальними даними, результатами інших теоретичних досліджень і підтверджена апробацією результатів дисертаційної роботи на вітчизняних і міжнародних конференціях.

Наукова цінність отриманих результатів визначається тим, що вони в сумі складають вагомий внесок до фізики конденсованого стану. Отримані в комп'ютерних експериментах результати, зокрема ті, що стосуються кінетики контактного плавлення та аналізу міжфазних явищ, дослідження впливу нелінійності екранування на кристалізацію кулонівських структур у заряджених колоїдах, передбачення явища спонтанної самоорганізації вихрових структур у замагнічених нерівноважних кулонівських системах, можуть слугувати основою для розробки нових моделей та стимулювати подальші експериментальні та теоретичні дослідження.

Практичне значення одержаних результатів пов'язане з їх можливим застосуванням для розробки і вдосконалення технологій отримання упорядковано-структурованих матеріалів та композитної кераміки, плазмових технологій обробки матеріалів.

Результати дисертаційної роботи з достатньою повнотою відображені у 41 науковій праці, з яких 18 – це статті в провідних вітчизняних та міжнародних фахових журналах з високим імпакт фактором, таких як *Physcal Review E*, *Physica Scripta*, *Physics of Plasmas*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Materials Research Express*, *Computational Materials Science*, *Український фізичний журнал*, тощо. 12 статей із загальної кількості надруковані у фахових журналах, що відносяться до першого та другого квартилів (Q1, Q2) за класифікацією *SCImago Journal and Country Rank*, 6 статей – у журналах, що відносяться до третього та четвертого квартилів (Q3, Q4). Крім того, автором опубліковано дві статті в збірнику та розділ у колективній монографії. Апробацію роботи засвідчують 20 публікацій праць та тез міжнародних конференцій.

Текст автореферату правильно відбиває основний зміст дисертації.

До дисертаційної роботи можна висловити ряд зауважень та запитань.

1. На підставі результаті моделювання зроблено висновок про самоорганізацію вихорів у нерівноважній замагніченій плазмі у планарних системах (розділ 5). Чи можливе аналогічне явище у тривимірній геометрії?
2. У розділі 5 для опису ймовірності рекомбінації використано співвідношення (5.18) і зауважено, що його можна отримати за певних наближень із рекомбінаційно-дифузійного рівняння. Доцільно було б навести виведення цього співвідношення. Чи використовувались у моделюванні інші розподіли ймовірності рекомбінації, як впливає на його результати?
3. На рис. 5.4 наведено результати дифузійного тесту Ланжевенівською динамікою. При цьому середньоквадратичне переміщення, отримане в моделюванні, хоча і узгоджується в цілому з теоретичною прямою, все ж, показує систематичне заниження при збільшенні часового проміжку. Як це можна пояснити?
4. У розділі 4 (стор. 157) указано, що формулу (4.19) можна розглядати як флуктуаційно-дисипаційне співвідношення, але надане далі пояснення виглядає недостатнім. Варто було б обговорити це питання детальніше.
5. У розділі 4 (стор. 137) використовується термін “слабкоіонізований газ високого тиску”. Бажано пояснити, що автор розуміє в даному контексті високим тиском.
6. Термін “однокомпонентна плазма”, вжитий у розділі 2, видається мені не зовсім доречним. Автор називає так плазму, властивості якої визначаються головним чином

підсистемою зарядів одного сорту, а інші заряди розглядаються як однорідний нейтралізуючий фон. Якщо згадати, що квазінейтральність є однією з основних характеристик плазми, то, очевидно, однокомпонентна плазма неможлива в принципі. 7. Робота добре оформлена, переважна більшість наведених рисунків гарної якості. Проте в тексті зустрічаються окремі описки та невдалі вирази.

Хочу наголосити, що висловлені зауваження та побажання не ставлять під сумнів основні результати представленої дисертаційної роботи і не знижують її загальної високої оцінки.

За обсягом, новизною, рівнем публікацій, науковим значенням отриманих результатів дисертація Бистренка О.В., виконана на високому науковому рівні, є завершеною кваліфікаційною роботою, що цілком задовольняє вимоги пп. 9, 10, 12, 13 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №567 від 24.07.2013 р. (зі змінами, внесеними згідно з постановами Кабінету Міністрів України №656 від 19.08.2015, №1159 від 30.12.2015, №567 від 27.07.2016, №943 від 20.11.2019 та №607 від 15.07.2020), які висуваються до докторських дисертацій. Вважаю, що Бистренко Олексій Васильович заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла.

Доктор фізико-математичних наук, професор,
завідувач кафедри радіотехніки та радіоелектронних систем
факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем
Київського національного університету імені Тараса Шевченка

І.О. Анісімов

16 квітня 2021 р.