

## Рецензія

на дисертацію Дмитра Любомировича Яремчука

“Моделювання функціональних полімерних матеріалів із магнето- та оптично-активними частинками та їх відгуку на зовнішні поля”

Дисертація Дмитра Яремчука присвячена вивченню деяких властивостей полімерних матеріалів на основі мікроскопічних уявлень про їх будову з допомогою аналітичних методів теоретичної фізики і комп'ютерного моделювання.

Конкретніше, магнеточутливі еластомери, що складаються з мікронних кульок м'якого феромагнітного матеріалу в, скажімо, силіконовій гумі, при вмиканні магнітного поля змінюють свої розміри (магнетострикція). Окрім того, вмикання магнітного поля може привести до агрегації кульок у витягнуті колоноподібні структури. Теоретичне пояснення таких явищ потребує знаходження енергії взаємодії між парою кульок, що намагнічуються при накладанні магнітного поля, для широкого інтервалу значень  $r/a$ , де  $r$  – відстань між кульками, а  $a$  – радіус кульки. Тільки вихід за межі наближення незалежних диполів передбачає притягання кульок на малих відстанях між ними, коли кути між вектором магнітного поля і вектором, що з'єднує кульки, більші за  $60^\circ$ , тобто утворення колоноподібних структур (незалежні диполі утворюють тільки ланцюгові структури). Далі, магнітні кульки в еластомері можуть бути розподілені не тільки рідиноподібно, але й ґраткоподібно. Цей факт враховується при обчисленні магнітної енергії зразка при ввімкненні магнітного поля. Повна енергія, яка містить ще й еластичну складову (з “пробною” зміною розмірів), вибирає такі розміри зразка, які її мінімізують. Всебічний теоретичний аналіз рівноважних деформацій сфероїдного магнеточутливого еластомера важливий для експериментальних досліджень та прикладних застосувань.

Другий оригінальний розділ дисертації (розділ 3) стосується 1) полімерних щіток – гребеноподібних полімерів з бічними групами, які чутливі до опромінення, а також 2) суміші полімерних щіток і декорованих наночастинок; такі системи вивчаються у комп'ютерних експериментах методом огрубленої молекулярної динаміки. У першому випадку вивчено, як опромінення впливає на такі характеристики як рідкокристалічні параметри порядку, середня висота полімерної щітки, яка приліплена одним кінцем до дна симуляційної комірки, чи самозбирання полімерних щіток. У другому випадку вивчено зміну просторового розподілу наночастинок за різних умов (наприклад, густини полімерних щіток).

Останній оригінальний розділ дисертації (розділ 4) стосується термочутливої полімерної щітки: полімерів ПНІПАМ (полі(N-ізопропіл-акриламід)), які приліплені одним кінцем до дна симуляційної комірки. Для ПНІПАМ температура розчинності у воді  $\epsilon \approx 32^\circ \text{C} \approx 305 \text{ K}$ ; нижче цієї температури ПНІПАМ набухає у воді, а вище – ланцюжки ПНІПАМ колапсують. Мезоскопічна модель враховує це через температурну залежність параметра сили водневих зв'язків між ПНІПАМ і водою. Моделювання пояснює скейлінгові властивості характеристик форми при  $T=298 \text{ K} \approx 25^\circ \text{C}$  і  $T=310 \text{ K} \approx 37^\circ \text{C}$ , які передбачає теорія, а також встановлює оптимальні параметри, за яких полімери ПНІПАМ можуть слугувати термочутливою функціональною поверхнею.

Зазначу, що результати, які представлені у дисертації Дмитра Яремчука, опубліковано у 4 статтях (Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Condensed Matter Physics, Liquid Crystals, Mathematical Modeling and Computing), вони також доступні на архіві препринтів <https://arxiv.org>. Крім того, результати дисертації представлялися на таких конференціях як МЕСО46 (Рига), Всеукраїнська конференція наукових дослідників (Ukrainian Research Association) (Львів), Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених (Львів), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Дослідження, підсумовані у дисертації, розвивають наукові традиції Інституту фізики конденсованих систем НАН України: електрострикція є предметом зацікавлень дослідників сегнетоелектричних кристалів з водневими зв'язками, магнеточутливі еластомери чимось подібні до магнітних рідин, інтерес до яких виникає в Інституті час від часу ще з кінця вісімдесятих років, дисипативна молекулярна динаміка, функціональні полімерні матеріали чи скейлінгові властивості полімерів є постійно у фокусі досліджень кількох груп упродовж останніх кількох десятиків років. З другого боку, Дмитро Яремчук приносить нові ідеї в інститутське середовище, як-от, демонструючи застосування методів електродинаміки суцільного середовища для магнеточутливих еластомерів. Цікава риса дисертаційних досліджень – поєднання різних технік і різноманіття цілей досліджень: з одного боку, математизовані дослідження при аналізі магнітної енергії мікронних кульок, а з другого – комп'ютерне моделюванням оптично- та термоактивних полімерів; з одного боку, застосування формалізму намистин Александра і де Жена для якісного/напівкількісного тлумачення результатів комп'ютерних симуляції, а з другого – націленість на встановлення оптимальних параметрів, що дозволили б подальші практичні застосування полімерних матеріалів. Мушу відзначити, що матеріал у дисертації зрозуміло викладений, огляд літератури (розділ 1) і список використаних джерел (266 позицій) дозволяють зрозуміти місце виконаних досліджень серед інших. Дисертація Дмитра Яремчука є у цілковитій згоді з моїм попереднім досвідом спілкування з ним на фізичному факультеті та в Інституті і свідчить про його здатність виконувати серйозні дослідження з теоретичної фізики.

Про критичні зауваження: я маю декілька питань, які допоможуть мені краще зрозуміти і оцінити результати. У розділі 2 продемонстровано, що кут нульової сили між вектором магнітного поля і вектором, що з'єднує кульки, може стати більшим за  $60^\circ$ , якщо вийти за межі наближення незалежних диполів. Але цей аналіз стосувався кульок однакового радіуса. Чи прийдемо до інших висновків

у випадку кульок різних радіусів? Про залежність кумулятивного профілю густини від координати  $z$  на рис. 3.14, чи не повинно тут виконуватися “правило сум”: площа під кривою пропорційна до числа наночастинок  $N_{NP}=20$ ? Ще одне дрібне запитання, чому в означенні середньої висоти щітки у правій стороні (4.15) є 2?

Загалом, на мою думку, дисертація “Модельовання функціональних полімерних матеріалів із магнето- та оптично- активними частинками та їх відгуку на зовнішні поля” – важливий крок у розвитку фізики полімерів у Інституті фізики конденсованих систем НАН України і в Україні загалом. Я переконаний, що вона задовольняє всім вимогам до такого типу дисертацій, а її автор — Дмитро Любомирович Яремчук — заслуговує ступеня доктор філософії (104 - фізика та астрономія; 10 - природничі науки).

м.Львів,

29 червня 2023 р.

Завідувач відділу квантової статистики

Інституту фізики конденсованих систем НАН України

доктор фіз.-мат. наук, професор

О.В. Держко