Рішення
разової спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Здобувач ступеня доктора філософії Назар Кукаркін, 1990 року народження, громадянин України, освіта вища: закінчив у 2015 році Львівський національний університет імені Івана Франка за спеціальністю «Фізика», аспірант Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, Львів, виконав акредитовану освітньо-наукову програму 104 «Фізика та астрономія» 10 «Природничі науки».

Разова спеціалізована вчена рада, утворена наказом директора Інституту фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського НАН України, Львів, від «21» серпня 2026 року № 06, у складі:

Голови разової спеціалізованої вченої ради - **Максим Дудка**, д.ф.-м.н., старший дослідник, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України;

Рецензентів - **Андрій Баумкетнер**, д.ф.-м.н., старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України,

Тарас Верхоляк, д.ф.-м.н., старший дослідник, завідувач відділу квантової статистики, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України;

Офіційних опонентів - **Степан Мудрий**, д.ф.-м.н., професор, професор кафедри фізики металів, Львівський національний університет імені Івана Франка,

Володимир Ковальчук, д.ф.-м.н., старший науковий співробітник, завідувач відділу макрокінетики природних дисперсних систем, Інститут біоколоїдної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАН України;

на засіданні «9» жовтня 2026 року прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» Назару Кукаркіну на підставі публічного захисту дисертації «Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Дисертацію виконано в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, Львів.

Науковий керівник: **Тарас Пацаган**, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, Інститут фізики конденсованих систем імені. І.Р. Юхновського НАН України, заступник директора.

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленого рукопису, викладеного українською мовою, що повністю відповідає вимогам пункту 6 Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44 (зі змінами), та містить нові науково обґрунтовані результати, а саме:

За допомогою моделювання методом Монте-Карло в канонічному ансамблі вперше систематично досліджено вплив форми та розмірів твердих несферичних частинок (димерів, жорстких і гнучких тримерів, спаяних ланцюгів, сфероциліндрів) на структурні властивості еквімолярних бінарних сумішей з твердими сферичними мономерами в об'ємній фазі та в невпорядкованому пористому середовищі.

На основі порівняння з результатами моделювання встановлено межі застосовності

полімерного наближення Перкуса–Євіка (PPY) для контактних значень радіальних функцій розподілу між сегментами жорстких тримерів і мономерами. Наближення добре працює, коли визначальним є вплив лише сусідніх сегментів, але систематично відхиляється від результатів моделювання, коли суттєвим стає вплив несуміжних сегментів.
Запропоновано модифіковану версію полімерного наближення Перкуса–Євіка (PPY1), яка через частку доступної поверхні сегмента явно враховує стеричне блокування цієї поверхні всіма іншими сегментами тримера. Модифікація забезпечила краще узгодження з результатами моделювання для гнучких тримерів у широкому діапазоні розмірної асиметрії сегментів. Вона також дозволила відтворити контактні значення між сегментами жорстких тримерів і мономерами у випадках, коли важливим є вплив несуміжних сегментів.
Використовуючи моделювання методом Монте-Карло у великому канонічному ансамблі, встановлено закономірності впливу розміру та просторового впорядкування адгезивних ділянок на рівноважну та селективну адсорбцію твердих дископодібних частинок на структурованій адгезивній поверхні.

Здобувач має 7 наукових публікацій за темою дисертації, з них 3 – статті у наукових періодичних виданнях, віднесених до квартиля Q4 згідно з класифікацією SCImago Journal and Country Rank у рейтингах років, в яких були опубліковані відповідні статті, що повністю відповідає вимогам пунктів 8, 9 Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії.
Перелік статей:
1. N. Kukarkin, T. Patsahan. *Contact values between segments of trimers and monomers in an equimolar binary mixture* // Mathematical Modeling and Computing — 2026. — Vol. 13, no. 2 — pp. 448-462 https://doi.org/10.23939/mmc2026.02.448 (Q4);
2. N. Kukarkin, T. Patsahan. Equilibrium adsorption of hard disks on patterned adhesive surfaces: a Monte Carlo simulation study // Journal of Physical Studies — 2026. — Vol. 30, no. 2. — P. 2604 https://doi.org/10.30970/jps.30.2604 (Q4);
3. N. Kukarkin, T. Patsahan. Monte Carlo simulation of selective adsorption in a two-component hard-disk mixture on patterned adhesive surfaces // Condensed Matter Physics — 2026. — Vol. 29, no. 2. — P. 23802 https://doi.org/10.5488/cmp.29.23802 (Q4).

У дискусії взяли участь (голова, рецензенти, офіційні опоненти, інші присутні) та висловили зауваження:

Максим Дудка, доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, дав позитивну оцінку дисертаційній роботі, без зауважень.

Андрій Баумкетнер, д.ф.-м.н., старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, висловив зауваження:
1. Всюди в дисертації використовуються еквімолярні суміші. Чому? Ви думаєте що внесок концентрації незначний і не вплине на висновки?
2. На рис 2.5(b) показано хім потенціал різних систем в присутності матриці. Чи приведені результати отримані для одної реалізації матриці? Чи може це усереднені дані за багатьма конфігураціями?
3. Недостатньо висвітлено питання того які фізичні системи і процеси/явища в яких вони беруть участь можуть бути розглянуті в рамках запропонованих моделей. Добре було б

побачити конкретні приклади, наприклад електроліти, над-критичні розчинники, розчини білків etc. Такий список дозволить краще зрозуміти актуальність поставленої задачі, а також визначити її місце в подальших дослідженнях.
4. В розділі 1.1 перелічується велике число непроникних об'єктів – сфероциліндрів, полімерних ланцюгів твердих кульок etc, які було досліджено в минулому. Думаю було б корисно представити цю інформацію у формі малюнка чи графа, з відповідними посиланнями, щоб було краще зрозуміло що вже відомо, а що ще належить дослідити.
5. Ст 28, речення "Звідси випливає, що точність TPT1 критично залежить від точності контактного значення радіальної функції розподілу системи відліку як функції густини". Я не впевнений що згоден з цим твердженням. Точність TPT1 наближення залежить в першу чергу від того як вибрано систему відліку і яким є член збурення. Для невдало вибраної системи відліку неважливо наскільки точно ми порахуємо її контакті значення. Результат все рівно буде незадовільним.
4. Два терміни "сплавлені" та "спаяні" використовуються для того, щоб позначити одне й те саме поняття. Це створює непотрібну плутанину
5. с. 40, речення «Зменшення пористості φ призводить до зростання значень $\beta\mu^{ex}$». Пористість позначається символом φ_0, а не φ.

Тарас Верхоляк, д.ф.-м.н., старший дослідник, завідувач відділу квантової статистики, Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, висловив зауваження:
1. У розділі 4 бінарну суміш досліджено за однакових хімічних потенціалів компонентів. Як, на думку автора, зміна їх різниці могла б вплинути на залежність селективності від розміру адгезивних доменів? Зокрема, чи можна очікувати збереження встановлених переваг певних розмірів доменів, якщо частинки компонента із сильнішим притяганням до поверхні мають меншу концентрацію в резервуарі?

Степан Мудрий, д.ф.-м.н., професор, професор кафедри фізики металів, Львівський національний університет імені Івана Франка, висловив наступні зауваження:
1. У другому розділі вплив пористого середовища досліджено для матриці з твердих сфер певного діаметра. Яких змін локальної структури плину можна очікувати при зміні розміру частинок матриці за сталої пористості? Зокрема, чи однаково позначиться зменшення характерного розміру пор на найближчому оточенні жорстких і гнучких тримерів, зважаючи на здатність останніх змінювати конформацію?
2. У третьому розділі гнучкий тример розглянуто як абсолютно гнучкий ланцюг із рівномірним розподілом кутів згину, тобто без урахування жорсткості зв'язків і коливальних ступенів вільності. Було б корисно прокоментувати, як скінченна жорсткість зв'язку та нерівномірний розподіл дозволених конфігурацій вплинули б на контактні значення.
3. На с. 65 в третьому розділі зазначено можливість подальшого вдосконалення полімерного наближення Перкуса-Євіка (PPY1) шляхом коригування другого доданка рівняння (3.7), важливого для опису контактних значень за вищих упаковок. Бажано було б конкретизувати, які фізичні чинники доцільно врахувати при такому коригуванні та які способи його здійснення автор вважає перспективними.
4. В останньому абзаці, в третьому розділі, на с. 69 було б доцільно чіткіше розмежувати обговорення результатів для гнучких і жорстких тримерів. Зокрема, слід уточнити, до якого типу тримерів належить твердження про відтворення чисельних результатів наближенням PPY1, та узгодити його з позначеннями кривих на рис. 3.10а. Варто також звірити позначення змінного діаметра в цьому абзаці, оскільки згадка про діапазон σ_B супроводжується поясненням впливу сегмента C.

5. У четвертому розділі, підрозділ 4.3.2, адсорбцію бінарної суміші досліджено за двох значень покриття поверхні доменами: σ_d=0.349 і 0.503. Чим зумовлений вибір саме цих значень? Яких змін у заповненні поверхні та селективності адсорбції можна очікувати при переході до меншого або більшого покриття, зокрема до σ_d=0.256 чи 0.785, розглянутих для однокомпонентної системи?
6. У четвертому розділі ізотерми адсорбції наведено як залежності від хімічного потенціалу. Для співставлення з експериментальними даними було б корисно пояснити, як цей параметр пов'язати з концентрацією частинок в об'ємній фазі, що перебуває в рівновазі з адсорбованим шаром. Які додаткові припущення потрібні для подання отриманих ізотерм як залежностей від цієї концентрації?

Володимир Ковальчук, д.ф.-м.н., старший науковий співробітник, завідувач відділу макрокінетики природних дисперсних систем, Інститут біоколоїдної хімії імені Ф. Д. Овчаренка НАН України, висловив зауваження:
1. У розділі 2 досліджено структурні властивості плинів коротких сфероциліндрів у невпорядкованій твердосферній матриці. Просторове обмеження, створене матрицею, може сприяти локальному орієнтаційному впорядкуванню частинок у приповерхневому шарі плину навіть за відсутності макроскопічного нематичного порядку. Чи можна очікувати такого ефекту в досліджених системах і як він міг би залежати від пористості матриці та співвідношення розмірів матричних частинок і сфероциліндрів?
2. Цікавим результатом розділу 3 є різноспрямований вплив гнучкості тримера на контактні значення для крайніх і центрального сегментів. Наведені геометричні ілюстрації було б доцільно доповнити порівняльною схемою, яка безпосередньо пояснювала б зменшення доступної для контакту поверхні крайніх сегментів та її збільшення для центрального сегмента при згинанні тримера.
3. У дисертації зазначено перспективність використання отриманих контактних значень для уточнення системи відліку в термодинамічній теорії збурень Вертгайма. Водночас було б бажано конкретизувати, для яких типів асоціативних систем урахування відмінностей між контактними значеннями крайніх і центральних сегментів може мати найбільше значення.
4. У розділі 4 енергія взаємодії частинки з адгезивним доменом задається пропорційною площі їхнього перекриття. Було б корисно докладніше обговорити фізичний зміст коефіцієнта пропорційності та можливості його зіставлення з характеристиками реальних адгезивних поверхонь. Які експериментальні системи автор вважає найбільш придатними для перевірки встановлених закономірностей?
5. Окремі позначення та терміни потребують уточнення та уніфікації. Зокрема, на с. 35 величину L названо довжиною сфероциліндра, хоча далі вона використовується як відстань між центрами його сферичних шапок; доцільно чітко розрізнити довжину циліндричної частини та повну довжину частинки. Декілька разів у дисертації застосовується вираз «тверді частинки складної форми». «Складна форма» - це відносне поняття. Точніше було б писати «частинки несферичної форми». Також, коли йдеться про вплив розмірів частинок, краще було б уточнювати, що мова йде про відносні, а не абсолютні розміри. Це зауваження стосується головним чином Вступу, оскільки для сторонньої людини це може здаватися неочевидним, однак це не стосується основного тексту, де ця обставина є цілком очевидною, і назви дисертації.
6. У тексті трапляються поодинокі друкарські та редакційні неточності: на рис.2.9 та 2.12 жорсткі тримери позначені як P1 замість P2, а гнучкі тримери - як P2 замість PF; на с.66 вказано, що різниця між контактними значеннями BM для гнучких і жорстких тримерів зникає при $\sigma_A \to 0$, де обидва випадки наближаються до однакового значення $\alpha_{BM} = 1.0$, в той час як правильним є значення $\alpha_{BM} = 0.75$; на с.67 вказано, що відбувається зменшення α_{AM} та

збільшення α_{BM} зі зростанням σ_B, а різниця між ними зменшується при великих σ_B, наближаючись до граничних значень 0.5 та 1.0 – насправді до граничних значень 0.5 та 1.0 наближаються самі значення α_{AM} та α_{BM}, а не їх різниця. На с. 91 приведені кількості вузлів квадратної ґратки для розташування доменів $N_d = N \times N$, де N = 90, 60 та 30 – здається замість 90 мало б бути 120.

Результати відкритого голосування:

«За» 5 членів ради,

«Проти» 0 членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада присуджує Назару Кукаркіну ступінь/ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – «Природничі науки» за спеціальністю (спеціальностями) 104 – «Фізика та астрономія».

Відеозапис трансляції захисту дисертації додається.

Голова разової спеціалізованої вченої ради ДФ 35.156.010 Дудка Максим Леонідович

Підпис М.Л. Дудки
засвідчую
Вчений секретар Т. Буровська

Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України * місто Львів * Україна * 05540014