

Відгук опонента
На дисертацію на здобуття наукового ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 — Фізика та астрономія.

Автор: ГОНЧАР Юліан Іван Михайло Назарович
Назва дисертації: Особливості скейлінгу при фазових переходах вище критичної вимірності та описі денатурації ДНК.—
Організація: Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2023.

05 лютого 2024 року

У дисертації розглядаються теоретичні проблеми, пов'язані з дослідженнями скейлінгу та універсальності в критичних явищах. Запропонована теорія передбачає, що термодинамічні потенціали є узагальненими однорідними функціями відповідних змінних поблизу критичної точки. Зокрема, було досліджено явище скейлінгу вище верхньої критичної вимірності та результати застосовано для опису складних полімерних систем. Актуальність теми дисертації підтверджується великою кількістю відповідних літературних джерел і робіт, виконаних на цю тему в різних авторитетних лабораторіях світу.

Дисертація базується на 5 статтях (2 у журналах та 3 в — arXiv) та 12 тезах, пов'язаних із застосуванням різноманітних законів скейлінгу та підходів теорії поля для опису термічної денатурації ДНК, ефектів скейлінгу для вільних граничних умов.

Структура роботи

Дисертація містить вступ, огляд літератури, чотири оригінальні розділи та висновки. Автор детально оглядає переважно англійськомовну наукову літературу (136 посилань, переважно оригінальні статті) і демонструє високу здатність формулювати та обговорювати наукові проблеми. Робота займає 108 сторінок, з них 5 сторінок додатків. У Вступі зібрано інформацію про актуальність обраних для дослідження проблем, описано цілі та завдання дослідження, наукову новизну роботи, практичну значущість, особистий внесок автора, та дані по апробації отриманих результатів.

У Розділі 1 дано короткий огляд літератури щодо тем дослідження, обговорено концепції універсальності, гіпотезу скейлінгу, співвідношення між експонентами, поведінку скейлінгу вище верхньої критичної вимірності та застосування ідей скейлінгу у фізиці полімерів. Цей розділ завершується аналізом існуючих проблем в даній області.

У Розділі 2 проаналізовано виконані дослідження скінченно вимірного скейлінгу вище верхньої критичної вимірності ($d = 5$, модель Ізінга). Поведінку скейлінгу намагніченості та ізотермічної сприйнятливості було вивчено на гіпер-кубічній решітці з вільними граничними умовами та розміром системи до $L=50$ ($3 \cdot 10^8$ сайтів). Застосовано кластерний алгоритм Вольфа і оцінено критичну поведінку теплових характеристик.

У Розділі 3 представлено дані щодо застосування вдосконалених методів обчислення для оцінки показників скінченно вимірного скейлінгу вище верхньої критичної вимірності. Проведено аналіз мод Фур'є та нулів Лі-Янга. Методологія була заснована на вже опублікованих роботах, але в той же час вона містить суттєвий оригінальний внесок автора. Для дослідження скейлінгу намагніченості використовувався оригінальний спосіб моделювання. Статті, що відповідають розділам 2 і 3, були представлені в Refs 1,2.

У Розділі 4 дано розгляд досліджень скейлінгу складної полімерної системи та проаналізовано термічну денатурацію ДНК у моделі Поланда-Шераги. У цьому розділі аналізуються показники скейлінгу, які визначають конформаційні властивості довгих гнучких полімерних ланцюгів у розчиннику та явище термічної денатурації ДНК. Було проаналізовано вплив гетерогенності ДНК на поведінку скейлінгу одно- та дволанцюгових ланцюгів. Отримано цікаві оцінки для вимірності простору $d = 3$. Результати були опубліковані в Refs 2,3.

У результаті роботи було зроблено кілька важливих висновків щодо законів скейлінгу та різноманітності законів скейлінгу в складних полімерних системах. Ці результати були сформульовані в підсумковій частині Висновки.

Дисертаційна робота закінчується частинами Бібліографія та Додатки. Зокрема, Додатки містять інформацію щодо апробації отриманих результатів та короткий опис ключових кроків алгоритму Вольфа для моделювання $d = 5$ моделі Ізінга поблизу критичної точки.

Питання та коментарі до захисту роботи:

У мене є лише декілька незначних коментарів, які наведено нижче:

1. Дані статистичного аналізу та інтервали похибок на деяких малюнках не наведено (наприклад, рис. 2.1, 2.2.2.12 тощо). Для кожної фігури бажано вказати кількість повторів сканів обчислень, що були усереднені, напр. для рис. 2.9 тощо...

2. На стор. 46 було зазначено, що «граничні умови встановлюються як вільні, тобто вузли на краях решітки не мають сусідів в одному з напрямків d ». Яка Ваша думка щодо відмінностей між розглянутою задачею та задачею з періодичними граничними умовами? Зважаючи на ваші професійні знання та досвід, чи вважаєте Ви, що це призведе до суттєвих змін?

3. Що Ви думаєте про поведінку різних оцінюваних значень для нескінченних систем $L \rightarrow \infty$ (рис. 2.9, 2.11, 2.13, 2.14).

4. Список публікацій дисертації дублюється на сторінках 9-11 та сторінках 103-105.

Крім незначних коментарів наведених вище, я хотів би поставити більш загальне запитання. Можливі практичні застосування отриманих теоретичних оцінок не обговорювалися. Зокрема, це дуже важливо для опису експериментальних даних по денатурації ДНК. Чи могли б Ви надати, якщо можливо, будь-які коментарі по цій частині?

Незважаючи на наведені вище зауваження, дана робота відповідає високим стандартам, необхідним для успішного захисту дисертації.

Підсумовуючи, сформульовані вище незначні зауваження і коментарі можуть бути вирішені в майбутніх дослідженнях, а дисертація може бути подана на захист. Юліан Гончар виконав важливу теоретичну роботу на високому рівні. Якість і рівень викладеної теоретичної методології та загалом всієї роботи дуже високі, а результати цікаві. Загальна оцінка тексту дисертації є позитивною, автор продемонстрував здатність до самостійної творчої роботи в даній галузі. Я рекомендую захист цієї дисертації без істотних змін.

Дата:

05.02. 2024

Підпис опонента:

Микола Іванович Лебовка



професор, доктор фізико-математичних наук

Організація:

Інститут біоколоїдної хімії імені Ф.Д. Овчаренка
НАН України, пр-т Вернадського, 42, 03142, Київ,
Україна, тел. (+38-044) 424-0378;

Електронна пошта: lebovka@gmail.com

Opponent's Report
On dissertation applied for the doctor of philosophy degree
Specialty 104 — Physics and astronomy

Author: HONCHAR Yulian Ivan Mykhailo Nazarovych
Thesis title: Scaling properties of phase transitions above the upper critical dimension and in the description of DNA denaturation
Author's Department: Institute for Condensed Matter Physics of the NAS of Ukraine and Coventry University.

February 05, 2024

Content of the Report:

The thesis considers the theoretical problems related with studies of scaling and universality in critical phenomena. The theory assumes that the thermodynamic potentials are generalized homogeneous functions of their respective variables in vicinity of critical point. Particularly, the scaling phenomena above the upper critical dimension were investigated and the results were applied for description of the complex polymer networks. The relevance of the topic of this dissertation is confirmed by a large number of relevant references and works carried out on this topic in various authoritative laboratories of the world.

The dissertation is based on 5 papers (2 in journals and 3 in archives) and 12 Abstracts related with application of variety of scaling laws and polymer field theory approaches for description of DNA thermal denaturation, effects of finite-size scaling in free boundary conditions.

Work structure

The dissertation includes an introduction, a literature review, four original chapters and conclusions. The author extensively reviews the mostly English-written scientific literature (136 references, mostly original articles) and demonstrates the high ability to synthesize and discuss scientific problems. The work covers 108 pages, including 5 pages of appendices. The Introduction collects information on the relevance of the problems chosen for research, purposes and objectives of the study, applied research methods, scientific novelty and importance of the work, personal contribution of author, and approbation of obtained results.

Chapter 1 with short literature review of the research topics discusses concept of universality, scaling hypothesis, relations between exponents, scaling behavior above the upper critical dimension, and application of scaling ideas in polymer physics. This chapter ends with analysis of existing problems.

Chapter 2 presents performed studies of the finite-size scaling above the upper critical dimension ($d = 5$, Ising model). The scaling behaviour of magnetisation and isothermal susceptibility were performed on the hypercubic lattice with free boundary conditions and system size up to $L=50$ ($3 \cdot 10^8$ sites). The Wolff cluster algorithm was applied. The critical behaviour of thermal characteristics was estimated.

Chapter 3 presents data on application of improved calculation techniques for evaluation of finite-size scaling exponents above the upper critical dimension. The Fourier modes and Lee-Yang zeros analysis was done. The methodology was based on relevant references but at the same time can be recognized as an original contribution of the author. The advanced modeling framework was used to study scaling of magnetisation. The papers corresponding to the 2 and 3 chapters have been already published in Refs 1,2.

Chapter 4 considers studies of the complex polymer network scaling and analysis of the thermal denaturation of DNA in Poland-Scheraga model. The chapter analyses the scaling exponents that govern conformational properties of long flexible polymer chains in a good solvent and phenomenon of DNA thermal denaturation. The effects of DNA chain heterogeneity in scaling behaviour of a single- and double-stranded chains were analysed. The interesting estimations for space dimension $d = 3$ were obtained. The results of this chapter have been published in Refs 2,3.

The work resulted in several important conclusions on complex scaling laws and the variety of scaling laws in complex polymer networks. These conclusions were objectively supported in the results part.

The thesis ends with the Bibliography and Appendices parts. Particularly, Appendices includes information on approbation of obtained results, and short description of the key steps of the Wolff algorithm to simulate $d = 5$ Ising model near the critical point.

Questions and commentaries for defense:

I have only a few minor comments that are given below:

1. Data on statistical analysis and error bars at the some figures were not presented (e.g., Fig. 2.1, 2.2.2.12, etc...). It is desirable to present number of repetitions for each figure, e.g. for Fig. 2.9 etc...
2. On p. 46 it was stated that “We set boundary conditions to be free, meaning that the sites on the edges of the lattice do not have a neighbour in one of the d directions.” What is your opinion about differences between the considered problem and problem with periodical boundary condition? According to your professionalism and expertise, do you think that this would have changed?
3. What do you think about behavior of different evaluated values for infinite systems $L \rightarrow \infty$ (Fig. 2.9, 2.11, 2.13, 2.14).
4. List of PhD publication is duplicated at pages 9-11 and pages 103-105.

Besides the minor comments above there is a more general practical question I would like to ask. The possible practical applications of the obtained theoretical evaluations were not discussed. Particularly, it is very important for description of experimental data on DNA denaturation. Could you provide, if possible, any insight into this part?

Despite the above comments, this work meets the high standards required for the defense of a dissertation..

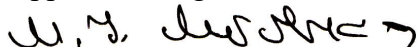
To conclude, the minor comments raised can be resolved in future investigations on the topics and in the dissertation can be submitted to the regular defense. Mr. Honchar did high level theoretical work. In general, the quality and level of the theoretical methodology outlined and of the work done is very high and the results are interesting. My overall assessment of the dissertation text is highly positive, the author has demonstrated the ability of independent creative work in the given field. I recommend the thesis to be defended without major changes.

Date:

05.02. 2024

Opponent's Signature:

Nikolai Lebovka



Professor, Doctor of Sciences Hab.

Opponent's Affiliation:

Biocolloidal Chemistry Institute named after F.D. Ovcharenko, NAS of Ukraine, 42 Vernadskii av., 03142, Kyiv, Ukraine, Phone (+38-044) 424-0378; E-mail: lebovka@gmail.com