

## РІШЕННЯ

### щодо присудження наукового ступеня доктора наук

Спеціалізована вчена рада з присудження наукового ступеня доктора наук  
Д 35.156.01 Інституту фізики конденсованих систем

(шифр докторської ради, повне найменування закладу вищої освіти (наукової установи),

Національної академії наук України

прийняла рішення

підпорядкування (у родовому відмінку)

про присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук  
(галузь науки)

Гайдуківській Христині Аркадіївні

(прізвище, ім'я, по батькові (за наявності) здобувача у давальному відмінку)

на підставі прилюдного захисту докторської дисертації

«Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур»

(назва докторської дисертації)

у вигляді на правах рукопису \*/ з грифом (при необхідності)  
(на правах рукопису, опублікованої монографії, наукової доповіді)/(таємно, для службового користування)

за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика (104 — Фізика та астрономія)

(шифр і назва наукової спеціальності за чинним переліком)

« 19 » березня 2025 року, протокол № 7 .

Гайдуківська Христина Аркадіївна

1987 року народження,

(прізвище, ім'я, по батькові (за наявності) здобувача)

громадянин України ,

(вказується назва держави, громадянином якої є здобувач)

освіта вища: закінчила у 2011 році Львівський національний університет імені Івана Франка

(найменування закладу вищої освіти)

за спеціальністю Фізика .

(за дипломом)

Наукові ступені і вчені звання (перелічуються у порядку їх присудження чи присвоєння за наявності):

кандидат фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика з 2016 року.

Закінчила докторантуру 2021 р. при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Працює на посаді наукового співробітника в Інституті фізики конденсованих систем, Національної академії наук України, м. Львів

(посада) (основне місце роботи, відомче підпорядкування, місто)

з 2021 р. до теперішнього часу.

Докторська дисертація виконана у Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

(назва підрозділу, найменування закладу вищої освіти, наукової установи)

Науковий консультант (за наявності) Блавацька Вікторія Богданівна .

(прізвище, ім'я, по батькові (за наявності),

доктор фізико-математичних наук, старший дослідник, Інститут фізики конденсованих систем  
НАН України, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем

(науковий ступінь, вчене звання, місце роботи, посада)

Рекомендовано до захисту 15 жовтня 2024 року.

Здобувач має 26 наукові публікації за темою дисертації, з них 14 статей в наукових фахових виданнях, 12 матеріалів та тез конференцій.

Опоненти:

Лев Богдан Іванович, доктор фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, професор за спеціальністю теоретична фізика, академік НАН України, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, завідувач відділу синергетики, дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. Аналітичний метод, використаний в цій роботі, дає виключно статистичний опис полімеру, враховує ефект забороненого об'єму лише наближено без прив'язки до термодинаміки, в той час коли ланжевеннова динаміка містить залежність від температури. Чи не містить порівняння між аналітичними методами та молекулярною динамікою систематичної похибки?
2. Попереднє зауваження можна підсилити тим, що статистичне описання навіть при наявності дисипації, можна розглядати методом Onsager-Machlup і отримати відповідну залежність від температури. А такий підхід навіть не згадується.
3. У роботі йде мова про порівняння відношень характерних розмірів, а не самих значень радіуса гірації чи гідродинамічного радіуса. Чи можливо зробити пряме порівняння? Обговорення цього моменту в роботі є недостатнім.
4. На мою думку в роботі недостатньо уваги приділено аргументації впливу вузлів у структурах, що містять кільця чи петлі, та чому вони не розглядаються в роботі.

Ровенчак Андрій Адамович, доктор фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, професор кафедри теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, професор кафедри теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука, дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. У дисертації розглянуто кілька типів складногалужених полімерів, однак не завжди чітко пояснено можливість їхньої реалізації в експериментальних умовах. В оглядовій частині роботи є багато покликів на результати експериментів, однак оригінальні розділи містять досить мало порівнянь саме з реальними (не чисельними) експериментами: навіть корінь «експеримент» трапляється 29 разів у розділі 1 з оглядом літератури і також 29 разів у решті тексту роботи.
2. У кількох розділах роботи описано чисельне моделювання, однак не зазначено параметрів, які можуть бути корисними для оцінки складності розрахунків, як-от розміри симуляційного бокса, фізична тривалість розрахунків (тиждень чи 10 хв, наприклад), використана архітектура та ін.
3. У табл. 2.2 наведено точні значення розмірних відношень, однак, як здобувачка зазначає в обговоренні цих результатів, для сприйняття варто було навести наближення в десятковій формі. Не зовсім зрозуміло, чому їх просто не включено в саму таблицю.
4. Низка формул, що відображають аналітичні результати, є дуже громіздкими, особливо формула (5.25). Точні вирази для коефіцієнтів дають мало інформації читачеві і дуже складно сприймаються візуально. Багато з таких виразів варто було перенести в додатки. А розклади, що містять гіпергеометричну функцію, часто ще й можна переписати простішими способами, наприклад:  ${}_2F_1\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \frac{1}{5}\right) \rightarrow -\frac{15}{2}\sqrt{5}\left(2\sin^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right) - 1\right)$
5. У формулах (3.49), (3.53) можливо видається поява гамма-функції від нуля. Цю ситуацію варто було прокоментувати.
6. Формула (3.72) містить означення тета-функції Гевісайда. Дивно, що в такому разі за першої появи позначення  $\Gamma(x)$  не зазначено, що це гамма-функція, а позначення для

гіпергеометричної функції  ${}_2F_1$  взагалі ніяк не прокоментовано (натомість у розділі 4 вже використано hypergeom).

7. У тексті непоодинокими є друкарські та пунктуаційні помилки, неточності у формулах, зокрема відсутність диференціалів під знаком інтеграла, трапляються накладання формул на номери тощо.

Токарев Віктор Сергійович, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.06 - хімія високомолекулярних сполук, старший науковий співробітник за спеціальністю хімія високомолекулярних сполук, Національний університет «Львівська політехніка», професор кафедри органічної хімії Інституту хімії та хімічних технологій, дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. При написання роботи бажано використовувати загальноприйнятну наукову термінологію. Зокрема "поліестрні смоли", а не "поліестрові гуми"; "ступінь свободи", а не "ступінь вільності"; "зв'язування хімічними зв'язками", а не "склеювання хімічними зв'язками".
2. При описанні будови пом-пом та гантелькових полімерів автор помилково називає ланцюги (гілки аба петлі), що виходять з центрів галуження, боковими. Вони є кінцевими, оскільки приєднанні до кінців основного ланцюга. Бокові – це ті, що преднанні збоку до середньої частини основного ланцюга, як у грибінчатих або йоршикових полімерах.
3. Не можна погодитись з автором, що відстань між вільними кінцями бокових ланцюжків, які знаходяться на одному "помі", у порівнянні з відстанню між вільними кінцями ланцюжків на різних "помах" –  $g_c$  характеризує середню асиметрію пом-пом полімеру в паралельному і перпендикулярному напрямках до лінії, що з'єднує центри галуження. (дис. с.128). В цьому випадку цей параметр мав би зростати зі збільшенням ступіня галуження, а він зменшується (дис. рис. 4.6).
4. На с.165 (дис.) і с.25 (реф.) наведено твердження, що суперечать одне іншому "розмірне відношення  $g_c$  знижується зі зростанням параметрів галуження, що відповідає зменшенню характерного розміру сніжинкоподібних макромолекул у порівнянні з лінійним полімером такої ж маси." і "Це явище спостерігається однаково при пониженні обох параметрів галуження..".
5. У підписах до рис. 5.12 і 5.13 зазначено "Розмірне відношення  $g_c$  як функція параметру  $l...$ ", а на осі абсцис вказано  $\ln(a)$ .
6. В дисертаційній роботі і рефераті є чисельні друкарські та пінктуаційні помилки, іноді однакові параметри позначаються різними символами, що ускладнює читання роботи.

На докторську дисертацію та реферат надійшов відгук:

Ярослав Патурей, доктор габілітований, професор університету Сілезії в Катовіцах, надіслав позитивний відгук без зауважень.

У дискусії взяли участь члени докторської ради:

Тарас БРИК, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Петро КОСТРОБІЙ, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Мирослав ГОЛОВКО, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Ярослав ІЛЬНИЦЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.24

Ігор МРИГЛЮД, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Юрій ЯРЕМКО, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Володимир ТКАЧУК, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Юрій ГОЛОВАЧ, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.02

Олег ДЕРЖКО, доктор фізико-математичних наук, спеціальність 01.04.07

---

(власні імена і ПРІЗВИЩА, наукові ступені, спеціальності, зауваження)

та присутні на захисті фахівці

(власні імена і ПРІЗВИЩА, наукові ступені, місця роботи, посади, зауваження)

При проведенні таємного голосування виявилось, що із 16 членів докторської ради, які взяли участь у голосуванні (з них 7 докторів наук за профілем дисертації), проголосували:

«За» 16 членів докторської ради,  
«Проти» 0 членів докторської ради,  
недійсних бюлетенів 0.

## ВИСНОВОК

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 щодо докторської дисертації  
Гайдуківської Христини Аркадіївни  
«Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур»

Докторська дисертація Гайдуківської Х.А. є завершеною науковою працею, присвяченою теоретичному описові та чисельному моделюванню складногалужених полімерів у сильнорозведених розчинах, що можуть містити скорельовані домішки. Робота зосереджена на кількісному аналізі розмірних параметрів, а саме радіуса гірації та гідродинамічного радіуса, за допомогою аналітичного підходу в рамках неперервної моделі полімеру. У роботі детально вивчається, як архітектура полімерів впливає на їх конформацію, від простих ідеальних розеткових структур до складних гіперрозгалужених полімерів у добрих розчинниках. Для ідеальних полімерів отримано точні математичні вирази, що описують їх розмірні характеристики. Встановлено, що збільшення розгалуження призводить до зменшення розміру полімерів. Для полімерів у добрих розчинниках отримано кількісні оцінки розміру і показано, що розгалуження завжди спричинює ущільнення полімерної структури. Результати аналітичного аналізу підтверджуються числовим моделюванням. Числові значення універсальних розмірних характеристик складнорозгалужених макромолекул у доброму розчиннику можуть бути застосовані для моделювання гідродинамічних та в'язкопружних властивостей полімерних розчинів. Дані, отримані для ідеальних полімерних структур, є цінними для подальшого аналізу концентрованих полімерних розчинів та розплавів, а також для прогнозування характеристичних розмірів у самоорганізованих матеріалах.

### Найсуттєвіші результати

1. Узагальнено аналітичний підхід прямого полімерного перенормування на випадок складних мультігалужених полімерних структур (пом-пом, сніжинка, йоршик). Отримано точні аналітичні вирази для характеристик розміру складногалужених полімерів в тета-розчині та проведено оцінку цих характеристик у доброму розчиннику.
2. Розроблено та перевірено алгоритм для точного обчислення гідродинамічного радіуса моделі гаусових полімерів, використовуючи неперервну модель. Отримано точні значення цього параметра для різноманітних складних полімерних архітектур. Показано, що в розеткових полімерах, із збільшенням ступеня розгалуження та в полімерних мережах із збільшенням зв'язності, співвідношення між радіусом гірації та гідродинамічним радіусом зменшується, наближаючись до одиниці.
3. Досліджено вплив виключеного об'єму на розмір складногалужених полімерів (пом-пом, розетки, гантелі). Отримані аналітичні результати добре узгоджуються з даними чисельного моделювання. Виявлено, що збільшення ступеня розгалуження та наявність кілець у структурі полімеру призводять до його компактифікації.
4. Досліджено, як відносна довжина структурних елементів впливає на універсальні властивості складних полімерних архітектур з двома або більше центрами розгалуження. Для полімерів з двома центрами розгалуження показано, що зі збільшенням відносної довжини сегмента між цими центрами, характерний розмір наближається до розміру лінійного полімеру.
5. Досліджено, як змінюються розмір і форма окремих гілок складних полімерів. Виявлено, що лінійні ланцюжки, які входять до складу складних розгалужених структур, стають більш видовженими та асиметричними порівняно з вільними ланцюжками. При цьому ланцюжки, що

мають лише один вільний кінець, менш видовжені порівняно з ланцюжками, обидва кінці яких закріплені в центрах галуження.

6. Використовуючи як аналітичні, так і чисельні методи, було продемонстровано, що показники скейлінгу, які описують ефективний розмір складних розгалужених блок-кополімерів, не залежать від типу взаємодії між мономерами на різних сегментах.

7. Проведено кількісний аналіз впливу взаємодії між мономерами на розмір розеткових полімерів. Встановлено, що наявність далекосяжної взаємодії (електростатичної або зумовленої безладом) призводить до збільшення їхнього характерного розміру.

### **Достовірність наукових результатів**

Достовірність результатів, отриманих у дисертаційній роботі підтверджується такими фактами. Центральною в роботі є неперервна модель для полімерів, яка розширюється на випадок складногалужених архітектур. Отримані в рамках цієї моделі результати в граничних випадках відтворюють відомі в літературі результати для лінійних, зіркових кільцевих та гребінцевих полімерів. Ці результати також порівнюються з даними чисельного моделювання методами Монте Карло, дисипативної та ланжевенової динамік, а також окремими наявними експериментальними даними. У випадку ідеальних полімерних ланцюжків аналітичні передбачення та дані ланжевенової динаміки мають хороше кількісне узгодження. Кількісне узгодження також спостерігається у випадку полімерів у доброму розчиннику, коли в рамках аналітичного підходу використовується наближення Дугласа-Фріда. Натомість, результати прямого полімерного перенормування в першому порядку за відхиленням від верхньої критичної вимірності мають якісно узгоджуються з даними чисельного моделювання.

### **Новизна наукових результатів**

1. Запропоновано узагальнення неперервної моделі для опису складногалужених архітектур. Детально описано, як отримати статистичну суму для таких складних архітектур.

2. В рамках неперервної моделі розроблено алгоритм, що дозволяє точно визначати гідродинамічні радіуси ідеальних полімерів із складною архітектурою. Показано, що цей алгоритм розрахунку є універсальним і застосовується у всіх випадках, де є ефективним алгоритм де Клуазо для обчислення радіуса гірації.

3. Досліджено, як галуження впливає на ймовірність утворення петель у полімерних структурах. Виявлено, що збільшення ступеня галуження зменшує ймовірність утворення петель навколо центрального мономеру, але збільшує ймовірність утворення петель в інших частинах структури через збільшення кількості можливих комбінацій. Присутність корельованих домішок у системі знижує ймовірність утворення петель і зменшує ефект компактифікації, тоді як у чистому середовищі наявність петель значно збільшує компактифікацію.

4. Встановлено, що наближення Дугласа-Фріда є надійним методом кількісної оцінки розмірних характеристик полімерів у доброму розчиннику для широкого спектра полімерних структур, включаючи розеткові, пом-пом, гантелькові та сніжинкові полімери, в широкому діапазоні параметрів галуження. Для цих макромолекул результати, отримані за допомогою наближення Дугласа-Фріда, добре узгоджуються з даними чисельного моделювання, отриманими методами Монте-Карло, дисипативної динаміки та молекулярної динаміки, як з урахуванням, так і без урахування поправок на скінченно-розмірний скейлінг. Наближення також показало свою ефективність для обмеженого набору параметрів архітектури йоршикових полімерів.

5. Проведено аналіз впливу ступеня галуження та відносних ступенів полімеризації на розмір полімерних макромолекул у доброму розчиннику. Встановлено, що різні структурні елементи розтягуються по-різному залежно від архітектури.

6. Знайдено нерухомі точки перетворення ренормгрупи для моделі n-блокових кополімерів і встановлено, що в рамках неперервної моделі можна врахувати лише два типи блоків, які відповідають двом різним скейлінговим законам. Для лінійних n-блокових кополімерів досліджено вплив розташування блоку в структурі на його розмір. У випадку складних розгалужених кополімерів обчислено ефективні скейлінгові показники, які залежать лише від взаємодії мономерів у межах блоку і не залежать від взаємодії між мономерами різних блоків.

## Значення отриманих результатів та їх застосування

Результати цієї роботи, а саме числові значення універсальних розмірних характеристик складнорозгалужених макромолекул у доброму розчиннику, можуть бути застосовані для моделювання гідродинамічних та в'язкопружних властивостей полімерних розчинів. Дані, отримані для ідеальних полімерних структур, є цінними для подальшого аналізу розведених і концентрованих полімерних розчинів та розплавів, а також для прогнозування характеристичних розмірів у самоорганізованих матеріалах. Ключовим досягненням роботи є розроблений алгоритм точного розрахунку гідродинамічного радіуса складних розгалужених полімерів, що сприяє розвитку досліджень гідродинамічних властивостей полімерних розчинів.

Результати дисертаційної роботи можуть бути використані в Інституті фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів), Інституті теоретичної фізики імені М. М. Боголюбова НАН України (м. Київ), Інституті фізики НАН України (м. Київ), Національному університеті "Львівська політехніка" (м. Львів), Львівському національному університеті імені Івана Франка (м. Львів), Київському національному університеті імені Тараса Шевченка (м. Київ), Інституті хімії високомолекулярних сполук НАН України (м. Київ), інших науково-дослідних інститутах та закладах вищої освіти.

Рада констатує, що дисертаційна робота Гайдуківської Христини Аркадіївни «Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур» є оригінальним і завершеним науковим дослідженням та задовольняє вимоги Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17 листопада 2021 року № 1197 із змінами, внесеними згідно з Постановами Кабінету Міністрів України № 502 від 19.05.2023 і № 507 від 03.05.2024.

На підставі результатів таємного голосування та прийнятого висновку докторська рада присуджує

Гайдуківській Христині Аркадіївни

(прізвище, ім'я, по батькові (за наявності) здобувача у давальному відмінку)

науковий ступінь доктора фізико-математичних наук

(галузь)

за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

(шифр і назва наукової спеціальності)

Головуючий на засіданні  
спеціалізованої вченої ради з  
присудження наукового  
ступеня доктора наук

Д 35.156.01  
(шифр ради)

(підпис)

Ігор МРИГЛОД  
(власне ім'я  
ПРИЗВИЩЕ)

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради  
з присудження наукового  
ступеня доктора наук

(підпис)

Андрій ШВАЙКА  
(власне ім'я  
ПРИЗВИЩЕ)

М. П.  
(за наявності)

« 19 » березня 2025 року

