

Рішення
спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Спеціалізована вчена рада ДФ 35.156.005 Інституту фізики конденсованих систем
(повне найменування закладу вищої освіти (наукової
Національної академії наук України, м. Львів прийняла рішення
(установи), підпорядкування (у родовому відмінку), місто)
про присудження ступеня доктора філософії галузі знань 10 Природничі науки
(галузь знань)
на підставі прилюдного захисту дисертації “Особливості скейлінгу при фазових переходах вище
верхньої критичної вимірності та описі процесів денатурації ДНК” (Scaling properties of phase
transitions above the upper critical dimension and in the description of DNA denaturation)
(назва дисертації)
за спеціальністю 104 Фізика та астрономія
(код і найменування спеціальності відповідно до Переліку галузей знань і
спеціальностей, за якими здійснюється підготовка здобувачів вищої освіти)
" 7 " березня 2024 року.

Гончар Юліан-Іван-Михайло Назарович 1996 року народження,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності) здобувача)
громадянин України
(назва держави, громадянином якої є здобувач)
освіта вища: закінчив у 2019 році Національний університет “Києво-Могилянська академія”
(найменування закладу вищої освіти)
за спеціальністю Фізика
(за дипломом)

Працює молодшим науковим співробітником в Інституті фізики конденсованих систем
Національної академії наук України, м. Львів
(посада) (місце основної роботи, відомче підпорядкування, місто)
з 2023 р. до цього часу.

Дисертацію виконано у Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук
України, м. Львів, та

Університеті Ковентрі, Ковентрі, Велика Британія
(найменування закладу вищої освіти (наукової установи),
підпорядкування, місто)

Науковий керівник (керівники) Головач Юрій Васильович,
(прізвище, ім'я, по батькові (у разі наявності),
доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, Інститут фізики
конденсованих систем Національної академії наук України

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

Кенна Ральф, доктор природничих наук, професор, Університет Ковентрі, Велика Британія

Здобувач має 16 наукових публікацій за темою дисертації, з них 1 стаття у періодичних
наукових виданнях інших держав, 1 стаття у наукових фахових виданнях України, _____

монографій (вказати три наукові публікації):

1. Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu., Variety of scaling laws for DNA thermal denaturation. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2021. — Vol. 573. — P. 125917. (Scopus Q1)

2. Holovatch Yu., von Ferber C., Honchar Yu., DNA thermal denaturation by polymer field theory approach: effects of the environment. Condensed Matter Physics. — 2021. — Vol. 24. — P. 33603. (Scopus Q3)

3. Honchar Yu., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. When correlations exceed system size: finite-size scaling in free boundary conditions above the upper critical dimension. // preprint ArXiv.: 2023. arXiv:2311.11721. (to appear in Condens.Matter Phys 2024, 1)

У дискусії взяли участь голова і члени спеціалізованої вченої ради та присутні на захисті фахівці:

М.Л. Дудка: I believe the results obtained in this thesis represent a significant advancement in the modern theory of phase transitions. The novelty and relevance of Yulian Honchar's research, in my opinion, are caused primarily by the deeply thought-out formulation of the problem, thanks to the amazing intelligence of his co-advisers, Prof. R. Kenna and Prof. Yu. Holovatch. Having attended many scientific meetings where Yulian Honchar presented his research, and having had the opportunity to engage in discussions with him, I can affirm that he has mastered modern analytic methods of theoretical physics as well as computational techniques used in numerical simulations of physical problems, thus becoming a skilled scientist. The reliability and novelty of his results are further corroborated by their publication in two authoritative international scientific journals. Additionally, his findings have already been accepted for publication as a regular scientific paper in the Condensed Matter Physics journal. Moreover, the results were disseminated and discussed at 11 scientific Ukrainian and international conferences and workshops. Upon reviewing the thesis, I found no drawbacks in the scientific concepts utilized, the methods applied, or the calculations performed, and therefore I have no essential objections to the thesis

С.Вальд: In Chapter 1, the author reviews relevant literature of scaling theories and polymer physics. In terms of the scaling, the usual hyperscaling relations and the homogeneity hypothesis are discussed and the author then focuses on finite size scaling, the definition of pseudo-criticality and the introduction of the Q scaling theory. At a similar level of depth, the application of scaling theories to polymer physics is discussed. Models containing random walks and self-avoiding walks are introduced, as well as relevant scaling and star exponents. This chapter has room for some improvements: Although it is supposed to act as an introduction it rushes through many non-trivial concepts without properly introducing them. While I was able to follow sections 1.1. and 1.2. since it aligns with my background, section 1.3. was not easily accessible to me:

- a lot of jargon is used in this section.
- there are mistakes in Figures 1.1 (φ vs ϕ) and 1.2 (V1, V3 missing)
- variables are not introduced (e.g. \tilde{z} in Eq. (1.28), ...)

There are also a large number of orthographic, grammatical and typesetting errors in the text that hinder the accessibility of the manuscript. Unfortunately, this is true throughout the remainder of the manuscript.

In Chapter 2, the author presents their numerical results on the FSS in the five-dimensional Ising model with free boundary conditions. Simulating high-dimensional systems is challenging due to large boundary effects as the author acknowledges. However, the results are impressive in terms of breadth and quality.

After the Wolff algorithm and data analysis methods are introduced, the pseudocritical point T_L and its FSS is determined. This is followed by a scaling analysis of the magnetisation, magnetic susceptibility, internal energy and heat capacity at pseudocriticality and at criticality. Several of the results are found to be consistent with either Q scaling or Gaussian scaling however, some (e.g. the internal energy at pseudocriticality) are not. It would have been interesting to see a more in-depth discussion of this. Nevertheless, I judge these results of high scientific quality but their presentation could be improved. In the current form there is little context given and the chapter is a sequence of plots and their description. In Chapter 3, the author aims at substantiating their findings from Chapter 2 by analysing Fourier modes and Lee-Yang zeros. The partition function zeroes hint at G scaling at criticality and Q scaling at pseudocriticality. These results are interesting and methodically appealing since they do not require extensive system sizes to arrive at rather precise conclusion about the scaling behaviour. Therefore, I judge these contributions as very valuable to the field and debate around FSS above the upper critical dimension. In Chapter 4, the author analyses the denaturation of DNA. They use a model in which three chains are attached to each other and each chain is either modeled by a random walk or a self-avoiding walk. The main result of this chapter seems to be the new scaling relations for the loop closure exponents. I deem this result important and correct, however I find this part of the thesis the least accessible.

Ю. Козицький: The dissertation downsides which I decided to mention here may be divided into two types. Those of the first type are rather stylistic, which includes not so numerous typos and unclear parts of the description both in words and formulas. Among the latter one may name the expression for the partition function $Z_L(h)$ in eq. (1.24) on page 30, where z should be precisely connected with h . I guess it should be $z = eh$ with an explicit formula for A . Also, in the description of the macromolecules in the capture to Fig. 1.2, page 35, the author mentions points V_1, V_3 , which are not depicted. One may only guess as to the form of the subset of the lattice Z_d the principal domain which is taken in the simulations. Presumably, it is the cube L_d , but this ought to be explicitly stated. I also had problems with understanding formulas (4.26) (4.27) on page 77. The downsides of the second type characterize the way of presenting the key points of the study. For instance, it is not explained why the author takes the free boundary and the cubic principal domain. Why not to take the periodic boundary condition, which is translation invariant? In that case, one would avoid taking into account multiple Fourier modes in the magnetization M . Another possibility to mitigate the boundary effects could be to take a ball (it has a smaller bound) as the principal domain. Last but not least, one might expect to find in the dissertation how the numerical results obtained herein by means of advanced massive computations contribute to our understanding critical phenomena. Here I should mention, however, that my general impression from reading the dissertation is fully positive, and the criticism expressed in this report is just the usual component of the documents of this type.

М.І. Лебовка: 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 (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?

(прізвища, ініціали, наукові ступені, місця роботи, посади, зауваження)

Результати відкритого голосування:

"За" 5 членів ради,

"Проти" 0 членів ради

На підставі результатів відкритого голосування спеціалізована вчена рада присуджує

Гончару Юліану-Івану-Михайлу Назаровичу

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

ступінь / ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки

(галузь знань)

за спеціальністю 104 Фізика та астрономія

(код і найменування спеціальності відповідно до Переліку галузей знань і спеціальностей, за якими здійснюється підготовка здобувачів вищої освіти)

Голова спеціалізованої
вченої ради



(підпис)

Мриглод І. М.
(прізвище, ініціали)

Вчений секретар ІФКС НАН України



Бзовська І. С.