

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

ЯРЕМЧУКА Дмитра Любомировича

«Моделювання функціональних полімерних матеріалів із магнето- та оптично- активними

частинками та їх відгуку на зовнішні поля»,

поданої на здобуття ступеня доктора філософії

104 — фізика та астрономія 10 — природничі науки

Дисертаційна робота Яремчука Д. Л. присвячена актуальній проблемі моделювання функціональних полімерних матеріалів та їх відгуку на зовнішні стимули. В якості функціональних матеріалів досліджені магнеточутливі еластомери, фоточутливі рідкокристалічні полімерні щітки і термочутливі полімерні щітки. Актуальність теми даної дисертаційної роботи визначається необхідністю прогнозованої оптимізації властивостей цих матеріалів та передбаченні нових шляхів їх практичного використання. Актуальність також підтверджується великою кількістю сучасних оригінальних робіт, що виконується по цій тематиці в авторитетних лабораторіях світу, а також її зв'язком з великою ланкою держбюджетних тем, серед яких теми 2014-2018, № 0114U001048; 2019–2023, № 0119U100663; 2020-2021, № 0120U104864, № 0121U114069; 2022-2023, № 0122U002167 які виконувалися в Інституті фізики конденсованих систем НАН України і прямо пов'язані з дослідженнями багаточастинкових систем, розвитком теорії і комп'ютерного моделювання, а також макромолекулярних систем.

Дисертаційна робота складається з вступу, огляду літературних джерел, трьох оригінальних розділів і висновків. У **вступі** обґрунтовано актуальність проблеми, обраної для дослідження. Зокрема продемонстровано привабливі властивості магнеточутливих еластомерів, фізичні або механічні властивості яких можуть бути змінені під впливом застосування магнітного поля. Проаналізовано також інші типи функціональних матеріалів на основі рідкокристалічних еластомерів і полімерних щіток. Продемонстровано найбільш привабливі практичні застосування таких матеріалів. Визначена мета та задачі дослідження, завдання роботи, сформульовано наукову новизну отриманих результатів та їх практичне значення, а також охарактеризовано особистий внесок та публікації здобувача.

Розділ 1 присвячено літературному огляду сучасних уявлень щодо фізичних властивостей різних класів функціональних матеріалів. Наведено літературні дані стосовно розумних або стимулочутливі матеріалів, полімерних гелів та щіток і матеріалів на основі магніточутливих еластомерів. Викладено дані, що стосуються експериментальних і теоретичних досліджень, а також комп'ютерних симуляцій. Детально проаналізовано певні недоліки існуючих

теоретичних підходів. На основі аналізу цих питань викладено основні задачі, мотиви і обґрунтовано мету дисертаційної роботи. Зазначено наявність суттєвого дисбалансу між значним розвитком експериментальних досліджень в цій області і відносно незначним розвитком теоретичного опису таких систем.

У **розділі 2** представлено результати всебічних теоретичних досліджень ефекту магнітострикції в магнеточутливих еластомерах. Зокрема надається порівняння різних наближень для парних взаємодій між магнітними частинками. Цікавим є проведене порівняння аналітичних результатів для точкових диполів і для нерівномірно намагнічуваних сфер. Аналізується поведінка магнітної енергії та прояв фактора форми і вплив просторового розподілу частинок на величину і знак магнітострикції. Для узагальної моделі виявлено, що фактор магнітострикції залежить від об'ємної частки частинок ϕ в системі, що не спостерігається для спрощеної моделі точкових дипольних взаємодій. Розроблений підхід дозволяє дати пояснення утворення експериментально спостережуваних колоноподібних структур. Встановлено, що врахування неоднорідного намагнічення частинок не змінює вираз для розмагнічувального поля макроскопічного зразка, отриманий в теорії неперервного середовища

У **розділі 3** наведено результати комп'ютерних досліджень (метод обрубленої молекулярної динаміки) поведінки фоточутливих рідкокристалічних щіток гребенеподібної архітектури з хромофорними бічними групами. Зокрема аналізується реакція щітки на оптичні стимули і формування рідкокристалічної фази, розвинена мезоскопічна модель і дано аналіз впливу УФ опромінення. Цікавими є дані по аналізу впорядкування хромофорів у щітці під дією оптичних стимулів і ефекту випалювання. Аналізується також модель адсорбції наночастинок на рідкокристалічній щітці.

У **розділі 4** наведено результати роботи по моделюванню поведінки термочутливої щітки на основі полімеру полі(Н-ізопропілакриламід). Використовується метод дисипативної динаміки (DPD), що належить до класу мезоскопічних методів. Проаналізована скейлінгова поведінка ізолюваного термочутливого ланцюжка при температурах нижче і вище за нижню критичну температуру розчинності. На підставі цього аналізу встановлено, що нижче за нижню критичну температуру розчинності скейлінг відповідає випадку полімеру в доброму розчиннику, а вище цієї температури отриманий показник скейлінгу є дещо меншим ніж у режимі поганого розчинника, що пов'язано з м'якістю потенціалів відштовхування у DPD симуляціях. Результати аналізу конформаційних особливостей індивідуальних ланцюжків у щітці дозволяють говорити про оптимальну густину такої щітки для термоконтрольованої адсорбції, а дослідження рівня сольватації полімерів щітки допомагає пояснити причини існування такої густини в рамках теорії намистин Александра і де Жена.

В кінці роботи наведено основні висновки які цілком адекватно відображають отримані наукові результати. В цілому у дисертаційній роботі Яремчука Д. Л. вирішено важливу наукову проблему, пов'язану з вивченням поведінки різноманітних модельних функціональних матеріалів в зовнішніх полях. Застосовані методи ґрунтуються на теоретичних підходах і методах комп'ютерного моделювання. Достовірність результатів дисертаційної роботи підтверджується узгодженням отриманих даних між собою та з численними літературними даними.

При загальній позитивній оцінці роботи, у мене є наступні зауваження:

- 1) Стор. 6. Що таке режим “гриба”? Пояснення дано тільки в кінці роботи на стор 126.
- 2) Стор 40. Скорочення типу МЧЕ, ВИД. ПНПАМ небажано застосовувати в заголовках розділів, підрозділів. Незрозумілою є крапка в скороченні ВИД.
- 3) Стор. 96, Чому вибрана саме така модель декорованих наночастинок «НЧ складаються з великої центральної кульки (ядра), декорованої 12 лігандам»? Якій експериментальній ситуації це відповідає.
- 4) Стор. 99. Вказано, що розміри симуляційної комірки в редукованих одиницях довжини мають наступні виміри... Чи проводилися дослідження наявності скінченно вимірного скейлінгу?
- 5) Стор. 100. Чому вибрана температура $T = 480\text{K}$. Чи відповідає це експериментальній ситуації.
- 6) MD дослідження як правило потребують досить великої кількості повторень і відповідного усереднення. Ці питання не обговорюються в тексті.
- 7) Стор. 110. Констатується що «Розміри симуляційної комірки L_x , L_y та L_z – різні для випадку ізольованого індивідуального ланцюжків і випадку щітки, тому ці дані уточнюються в тексті для кожного випадку окремо.» З яких міркувань вибиралися ці розміри? Скільки було повторів? Чому не наведені похибки обчислень на рис. 4.1, 4.2 та інш.?

Однак, на загальну позитивну оцінку дисертаційного дослідження Яремчука Д. Л. ці зауваження суттєво не впливають, оскільки вони мають переважно дискусійний характер та певну основу для подальшого дослідження теми, а деякі з них є суто технічними.

Результати, представлені в дисертації, у повному обсязі викладені у 4 зарубіжних спеціалізованих виданнях (Journal of Magnetism and Magnetic Materials Q2, Mathematical Modeling and Computing Q3, Condensed Matter Physics Q4, Liquid Crystals Q2.), що входять до міжнародної наукометричної бази SCOPUS, опубліковано 2 статті в ArXiv e-prints, а також 3 тези доповідей на міжнародних та вітчизняних наукових конференціях. Представлені

здобувачем результати є новими та оригінальними, а сформульовані у дисертації висновки – науково обґрунтованими.

Вважаю, що за ступенем актуальності проблеми, новизни та практичної значущості отриманих результатів, обґрунтованості висновків, а також особистого внеску здобувача дисертаційна робота «Моделювання функціональних полімерних матеріалів із магнето- та оптично- активними частинками та їх відгуку на зовнішні поля», повністю відповідає вимогам "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 №44 від 12 січня 2022 року та з внесеними змінами згідно постанови Кабінету Міністрів України №341 від 21 березня 2022 року. Її автор, ЯРЕМЧУК Дмитро Любомирович, заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора філософії за спеціальностями 104 — фізика та астрономія 10 — природничі науки.

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор,

завідувач відділу фізичної хімії

дисперсних мінералів

Інституту біоколоїдної хімії

імені Ф.Д. Овчаренка НАН України

М.І. Лебовка