

РЕЦЕНЗІЯ

на дисертаційну роботу **Назара Кукаркіна**
«Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні
властивості модельних плинів»,
подану на здобуття ступеня доктора філософії
за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»
в галузі знань 10 «Природничі науки»

У статистичній фізиці плинів моделі твердих частинок посідають особливе місце. Попри простоту міжчастинкової взаємодії, ці моделі характеризуються нетривіальними просторовими кореляціями, зумовленими виключеним об'ємом частинок, і дають змогу досліджувати ентропійні механізми формування структури плину. Взаємна непроникність частинок накладає обмеження на їхнє відносне розташування, а для ланцюгових молекул — також на допустимі конформації. При цьому геометрія частинок істотно визначає характер просторових кореляцій, зокрема форму радіальних функцій розподілу. Виявлення та встановлення закономірностей такого впливу є важливим як для розуміння фундаментальних властивостей твердочастинкових систем, так і для розвитку теоретичних підходів до опису складніших плинів, у яких такі моделі можуть слугувати базовим наближенням. Розміщення твердих частинок у пористому середовищі супроводжується виникненням додаткових просторових обмежень, які істотно впливають на структуру плину та його рівноважні характеристики. Характер і ступінь цього впливу визначаються, зокрема, співвідношенням характерних масштабів частинок і пористого середовища. Тому дослідження просторових властивостей твердочастинкових систем в умовах обмеженої геометрії є важливим для з'ясування ролі геометричних факторів у формуванні характеристик плину. У дисертації Назара Кукаркіна досліджено вплив зазначених геометричних чинників на структурні властивості та адсорбцію систем твердих частинок складної форми. Актуальність цієї задачі полягає також у з'ясуванні механізмів, які визначають взаємозв'язок між структурою поверхні та рівноважними властивостями таких систем.

Робота складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел і двох додатків. У вступі визначено завдання дослідження, наведено положення новизни та відомості про особистий внесок здобувача. Перший розділ містить огляд літератури за тематикою, що обґрунтовує актуальність поставлених задач та вибір методів дослідження.

Зміст основної частини дисертації побудований від обговорення різних моделей до аналізу окремих властивостей розглянутих плинів. У другому розділі досліджено суміші мономерів із несферичними частинками в об'ємі та у невпорядкованому пористому середовищі, для яких розраховано радіальні функції розподілу. В третьому розділі на прикладі жорстких та гнучких тримерів в суміші з мономерами запропоновано аналітичний підхід для розрахунку

контактних значень радіальної функції розподілу між частинками. Четвертий розділ присвячено адсорбції частинок на неоднорідних поверхнях з розподіленими адгезивними ділянками. Таке поєднання задач дозволяє оцінити роль геометрії як самої частинки, так і її оточення.

Серед результатів другого розділу слід виділити встановлені відмінності між структурними характеристиками плинів ланцюгових частинок із вираженою сегментною структурою та сфероциліндрів. За допомогою комп'ютерного моделювання Монте-Карло розглянуто суміші мономерів з димерами, жорсткими і гнучкими тримерами, спаяними ланцюгами та сфероциліндрами, що дає можливість зіставити їхні властивості за радіальними функціями розподілу. При цьому характерні особливості кореляцій визначаються не лише видовженістю частинки, а й можливістю мономера наближатися до окремих ділянок її поверхні. Пориста матриця змінює кількісні характеристики цих залежностей, водночас зберігаючи якісні відмінності між досліджуваними моделями.

Цікавим результатом третього розділу є аналіз полімерного наближення Перкуса-Євіка для контактних значень сегмент-мономер та його покращення для суміші мономерів та тримерів. Автор встановлює, які обмеження доступу до сегмента не враховано у цьому наближенні, і включає їх у розрахунок. Особливо важливим є внесок несуміжного сегмента, який залежить від співвідношення розмірів частинок та конфігурації тримера і тому не може бути однаково врахований для всіх розглянутих випадків. У границі нескінченного розведення задача зводиться до визначення доступної частини контактної поверхні сегмента. Для гнучкого тримера додатково враховано різні дозволені конформації. На цій основі запропоновано наближення, яке краще узгоджується з комп'ютерним моделюванням за малих густин.

У четвертому розділі для дослідження адсорбції частинок на неоднорідній поверхні використано модель твердих дисків із притяганням до круглих доменів, розміщених на площині. Енергія притягальної взаємодії частинок із поверхнею в цій моделі залежить від площі перекриття частинки із адгезивними ділянками. Методом Монте-Карло досліджено просторові розподіли частинок в адсорбованому шарі на такій поверхні. Також показано як впливає розмір доменів і сумарна площа адгезивного покриття на ефективність адсорбції, фіксуючи при цьому один з цих параметрів. Отримані ізотерми адсорбції демонструють, що істотним є співвідношення розмірів частинки та домену, а також упорядкованість розміщення доменів. Для бінарної системи частинок з однаковими діаметрами частинок, але з різною енергією їх притягання до поверхні, показано як залежить структура адсорбованого шару від розмірів доменів. Проаналізовано, як геометричні параметри поверхні впливають на селективність адсорбції частинок в таких системах. Ці результати є важливими для подальшого теоретичного вивчення явищ адсорбції частинок на неоднорідних поверхнях та розробки відповідних функціональних матеріалів.

Висновки сформульовано відповідно до досліджених моделей і поставлених завдань.

Результати дослідження відображено у трьох статтях у журналах Mathematical Modeling and Computing, Journal of Physical Studies та Condensed Matter Physics, одному препринті і трьох тезах доповідей на конференціях. Наведені публікації висвітлюють основні положення дисертації.

Дискусійні питання та побажання щодо дисертаційної роботи:

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?

Це питання спрямоване на уточнення області застосування одержаних результатів і визначення можливих наступних кроків дослідження. Воно не заперечує висновків дисертації та не знижує її наукового значення.

Підсумовуючи оцінку роботи, вважаю, що Назаром Кукаркіним розв'язано поставлені наукові завдання та отримано результати, які доповнюють сучасні уявлення про структурні та адсорбційні властивості модельних плинів. Дисертація поєднує самостійний аналіз фізичної задачі, чисельні дослідження та розробку аналітичного наближення. Її зміст засвідчує належний рівень наукової підготовки здобувача.

Дисертаційна робота **«Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів»** 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 від 12 січня 2022 року № 44 (зі змінами), а її автор, Назар Кукаркін, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» в галузі знань 10 «Природничі науки».

Тарас Верхоляк

доктор фізико-математичних наук,
завідувач відділу квантової статистики
Інституту фізики конденсованих систем
імені І.Р. Юхновського НАН України