

## ВІДГУК ОПОНЕНТА

на дисертаційну роботу **Христини Аркадіївни Гайдуківської**  
на тему: «Характеристики розміру та форми в статистичному описі  
полімерних структур»,

представлену на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук  
за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика

### **1. Актуальність теми дослідження**

Дисертаційну роботу Христини Аркадіївни Гайдуківської присвячено вивченню універсальних характеристик полімерних структур у сильно розведених розчинах із застосуванням аналітичних методів та чисельного моделювання. Вона містить теоретичний аналіз розмірних і гідродинамічних властивостей складногалужених полімерів, а також результати їхнього чисельного моделювання.

Дослідження виконано в рамках сучасних напрямів статистичної фізики та фізики полімерів, що робить цю роботу актуальною для широкого кола фундаментальних і прикладних задач.

Останніми роками зростає інтерес до полімерів із нелінійною архітектурою, оскільки такі системи відіграють ключову роль у розробці нових матеріалів, біомедичних застосуваннях та нанотехнологіях. Дисертантка досліджує складногалужені полімерні структури (розеткові, пом-пом, йоршикові тощо), що дозволяє значно поглибити розуміння їхньої поведінки в розчинах і визначити основні впливові фактори. Робота є актуальною та відповідає сучасним викликам у фізиці конденсованого стану.

### **2. Обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій**

Результати дисертаційного дослідження базуються на поєднанні аналітичних методів та чисельного моделювання, що забезпечує їх високу достовірність. Усі отримані аналітичні розрахунки підкріплено чисельними експериментами (молекулярна динаміка, метод Монте-Карло), а результати узгоджуються з даними інших авторів. Обґрунтованість наукових положень і висновків роботи засвідчують публікації у високорейтингових журналах і виступи на представницьких конференціях і семінарах.

### **3. Наукова новизна та основні результати**

У роботі узагальнено неперервну модель полімерів для опису складних архітектур із двома і більше центрами галуження та запропоновано методику розрахунку гідродинамічного радіуса для таких структур. Проаналізовано вплив галуження на ймовірності петлеутворення, а також компактифікацію

макромолекул у присутності корельованих домішок. Показано, що наближення Дугласа–Фріда надійно працює для широкого класу полімерів, забезпечуючи хороше узгодження з чисельним моделюванням. Вперше досліджено вплив мультигалуженості та відносних ступенів полімеризації на характерний розмір структурних елементів макромолекул. Також розраховано ефективні скейлінгові показники для блокових кополімерів і підтверджено, що взаємодія між мономерами різних блоків не впливає на їхні розмірні характеристики.

Результати викладено в дисертації у вигляді вступу, огляду літератури, шести оригінальних розділів і висновків.

У Вступі подано обґрунтування актуальності теми, формулювання мети та завдань дослідження, визначення наукової новизни та практичної значущості результатів.

Розділ 1 містить огляд літератури з аналізом сучасних підходів до опису розмірних характеристик складногалужених полімерів.

У розділі 2 для розрахунку гідродинамічних характеристик полімерів із різною архітектурою використано неперервну модель. Запропоновано методикау точного розрахунку гідродинамічного радіуса для ідеальних полімерів, результати застосування якої підтверджує чисельне моделювання. Проведено аналітичні розрахунки для визначення радіусів гірації та гідродинамічних радіусів для складногалужених структур, що дозволяє встановити кореляції між розмірними характеристиками різних типів полімерів. Отримані результати демонструють узгодженість із молекулярною динамікою та вказують на відмінності в точності підходів залежно від архітектури полімерів.

Розділ 3 присвячено дослідженню полімерів з одним центром галуження та впливу петлеутворення на їхні універсальні властивості. Тут проаналізовано вплив короткосяжної та далекосяжної взаємодії на ймовірність утворення петель у зіркових і розеткових полімерах, показано, що далекосяжна взаємодія зменшує петлеутворення та викликає набухання макромолекули. Для розеткових полімерів розглядаються розмірні співвідношення з використанням ренорм-групового підходу та наближення Дугласа–Фріда, що підтверджується чисельними розрахунками. Отримані результати порівняні з молекулярною динамікою та демонструють гарне кількісне узгодження для полімерів із одним центром галуження.

У розділі 4 описано дослідження полімерів із двома центрами галуження, зокрема пом-пом та гантелькових полімерів, із застосуванням наближення Дугласа–Фріда. Аналітичні результати порівнюються з чисельним моделюванням (дисипативна динаміка, стрижневий алгоритм у методі Монте-Карло, молекулярна динаміка) і демонструють хороше узгодження. Особливу увагу приділено впливу відносної довжини основи та ступеня галуження на розмір і

форму макромолекул, що дозволяє передбачати поведінку таких структур у розчинах. Досліджено також нетривіальну залежність асферичності, яка на певних довжинах основи виявляється вищою, ніж у лінійних полімерів.

Розділ 5 присвячено гіпергалуженим полімерним структурам, зокрема йоршиковим і сніжинкоподібним полімерам, які не містять петель. Для сніжинкових полімерів показано, що наближення Дугласа–Фріда добре узгоджується з чисельним моделюванням за невисокого ступеня галуження, тоді як для йоршикових полімерів точність цього підходу залежить від співвідношення довжини основи та бокових гілок. Досліджено вплив ступеня галуження на форму макромолекул, зокрема, залежність асферичності від ефекту забороненого об'єму. Проведено аналітичні розрахунки для радіуса гірації та їх порівняння з чисельними симуляціями та експериментальними даними, що підтвердило покращення аналітичних передбачень.

У розділі 6 досліджено характерні розміри структурних елементів полімерів (макромолекул) і вплив архітектури на їхнє видовження. Досліджено видовження гілок зіркових полімерів, а також вплив далекосяжного відштовхування на розмірні характеристики розеткових полімерів. Для полімерів із двома центрами галуження вивчено розтяг основи, а для пом-пом структур — додатково вплив ступеня галуження та бокових гілок. Якісну оцінку проведено в рамках неперервної моделі, а кількісну — за допомогою чисельного моделювання.

Розділ 7 присвячено складним кополімерам. Показано, що в рамках неперервної моделі їхні скейлінгові показники розміру не залежать від взаємодії між мономерами різних сегментів. Чисельне моделювання методом Монте-Карло підтверджує цей результат для всіх розглянутих архітектур.

#### **4. Повнота викладу в наукових публікаціях**

За темою дисертації опубліковано 14 статей у виданнях, що індексуються у Scopus і Web of Science, із яких 11 — у журналах першого та другого квартилів за класифікацією Scimago Journal & Country Rank. Зокрема, хочу відзначити наявність публікацій у таких провідних виданнях, як *Scientific Reports*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Journal of Chemical Physics*, *Physical Review E* та *Journal of Molecular Liquids*. Дисертантка також представляла результати роботи на конференціях високого рівня в Україні та за кордоном. Усі результати, включені в дисертацію, опубліковані та добре апробовані.

#### **5. Відсутність академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації**

У дисертації та публікаціях Христини Гайдуківської не виявлено академічного плагіату, фабрикації чи фальсифікації результатів. Більшість

статей мають відмітку Crossmark, що забезпечує актуальність та достовірність контенту статті та гарантує прозорість (відсутність відкликання через помилки чи плагіат). Дисертантка докладно окреслила свій особистий внесок у спільних публікаціях. Ідеї, теоретичні засади, методи, а також експериментальні й теоретичні результати інших авторів, використані в наукових працях і дисертації, належним чином супроводжені посиланнями на відповідні джерела.

## 6. Дискусійні питання та зауваження

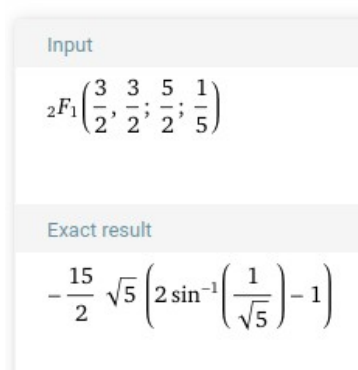
Робота виконана на високому науковому рівні, проте до неї можна висловити низку питань і зауважень, зокрема й технічного характеру:

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:



Input

$${}_2F_1\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; \frac{1}{5}\right)$$

Exact result

$$-\frac{15}{2} \sqrt{5} \left(2 \sin^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right) - 1\right)$$

5. У формулах (3.49), (3.53) можливою 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.

Ці зауваження, однак, не є принциповими та не знижують загальної високої оцінки роботи.

### 7. Загальний висновок

На підставі зробленого аналізу вважаю, що дисертаційна робота **Христини Аркадіївни Гайдуківської** «Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур» є завершеним науковим дослідженням, що має важливе значення для статистичної фізики та фізики полімерів. Робота повністю відповідає вимогам МОН України, що висуваються до дисертацій на здобуття ступеня доктора фізико-математичних наук відповідно до пп. 7–9 «Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 17 листопада 2021 р. №1197 (зі змінами), а її авторка заслуговує на присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика.

Опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри теоретичної фізики  
імені професора Івана Вакарчука  
Львівського національного університету  
імені Івана Франка

Андрій РОВЕНЧАК

