

Затверджую

Директор Інституту фізики
конденсованих систем НАН України
чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф.

Т. М. Брик

2024 р.

**ВИТЯГ**

з протоколу № 1254 фахового семінару
Інституту фізики конденсованих систем НАН України
від 19 вересня 2024 р.

1. ПРИСУТНІ 44 працівників Інституту фізики конденсованих систем НАН України, а саме:

1. Остап Романович БАРАН, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
2. Андрій Богданович БАУМКЕТНЕР, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
3. Ірина Степанівна БЗОВСЬКА, кандидат фізико-математичних наук, вчений секретар;
4. Вікторія Богданівна БЛАВАЦЬКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем;
5. Тарас Михайлович БРИК, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України;
6. Андрій Степанович ВДОВИЧ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
7. Олег Володимирович ВЕЛИЧКО, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
8. Тарас Михайлович ВЕРХОЛЯК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
9. Марта Валентинівна ГВОЗДЬ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
10. Тарас Валентинович ГВОЗДЬ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник, докторант;
11. Тарас Юрійович ГОЛОВАЧ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
12. Юрій Васильович ГОЛОВАЧ, доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, головний науковий співробітник;
13. Мирослав Федорович ГОЛОВКО, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, головний науковий співробітник;
14. Юліан Назарович ГОНЧАР, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
15. Тарас Ігорович ГУТАК, доктор філософії, молодший науковий співробітник;

16. Тарас Васильович ДЕМЧУК, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
17. Оксана Андріївна ДОБУШ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
18. Максим Леонідович ДУДКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем;
19. Олександр Львович ІВАНКІВ, кандидат фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи;
20. Василь Васильович ІГНАТЮК, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
21. Ілля-Микола Анджейович ІЛЕНКОВ, аспірант;
22. Ярослав Миколайович ІЛЬНИЦЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем;
23. Юрій Володимирович КАЛЮЖНИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник;
24. Остап Юрійович КАЛЮЖНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
25. Михайло Павлович КОЗЛОВСЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник;
26. Марія Ярославівна КОРВАЦЬКА, молодший науковий співробітник;
27. Іван Ярославович КРАВЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
28. Марія Іванівна КОПЧА, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
29. Мар'яна Богданівна КРАСНИЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
30. Олеся Михайлівна КРУПНІЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник;
31. Назар Борисович КУКАРКІН, аспірант;
32. Богдан Михайлович ЛІСНИЙ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
33. Ігор Миронович МРИГЛОД, доктор фізико-математичних наук, академік НАН України, головний науковий співробітник;
34. Тарас Миколайович ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи;
35. Ігор Васильович ПИЛЮК, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
36. Роман Васильович РОМАНІК, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник;
37. Роман Ярославович СТЕЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
38. Михайло Васильович ТОКАРЧУК, доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник;
39. Дмитро Юрійович ШАПОВАЛ, доктор філософії, молодший науковий співробітник;
40. Андрій Михайлович ШВАЙКА, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
41. Микола Андріанович ШПОТ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;

42. Ярослав Йосифович ЩУР, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;
43. Дмитро Любомирович ЯРЕМЧУК, доктор філософії, докторант, молодший науковий співробітник.
44. Юрій Григорович ЯРЕМКО, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник;

З присутніх – 19 докторів наук, 16 кандидатів наук та 6 докторів філософії (фахівців за профілем поданої дисертації).

Голова засідання – доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України Ю. В. ГОЛОВАЧ.

2. СЛУХАЛИ Доповідь наукового співробітника відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Христини Аркадіївни ГАЙДУКІВСЬКОЇ за матеріалами дисертаційної роботи “Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур”, поданої на здобуття ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – “теоретична фізика”.

Науковий консультант – доктор фізико-математичних наук, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем Вікторія Богданівна БЛАВАЦЬКА.

Робота виконана у відділі комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

По доповіді були поставлені питання, на які доповідач дав правильні та ґрунтовні відповіді:

Д.ф.-м.н., завідувач відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Я.М. ІЛЬНИЦЬКИЙ:

1) Ви кажете, що скейлінг для зірки є такий самий як скейлінг для лінійного ланцюжка з тим самим показником Флорі. Якщо зірка має безмежну кількість гілок, то вона фактично буде компактним об'єктом, який подібний до того, який є в стані колапсу з фрактальною вимірністю близько трьох. Отже, думка яку ви кажете, є недійсною для безмежної кількості гілок чи тут є якась інша причина?

Відповідь: Тут треба зауважити, що коли ми говоримо про зірковий полімер і про скейлінг, ми говоримо, що ланцюжки є безмежно довгими. Тому, варто згадати анзац Даоута-Коттона, в якому показано, що дуже близько до ядра ланцюжки є повністю видовженими і жорсткими. Якщо ланцюжків є багато, щоб утворити цей кор, але вони не є достатньо довгими, щоб вийти з нього, то утвориться компактний твердий об'єкт. Друга зона матиме гаусову поведінку. Якщо ланцюжки є достатньо довгі щоб вийти в цю зону, то матимемо трохи м'якшу поверхню навколо твердого шару. Коли ж ми говоримо про скейлінгові властивості, то мова йде про ланцюжки, які здатні вийти в третій шар, де поведінка описується показником Флорі, а ядро відіграватиме дуже незначну роль.

2) Оскільки розділ сильно зосереджений на технічних деталях і методах, то там, де робилось порівняння з молекулярною динамікою з 3000 мономерами, я маю підозру, що це була насправді не молекулярна динаміка, а динаміка Ланжевена, де не було розчинника, бо інакше такі розміри не досягаються. То мені здається, що це треба чітко казати, тому що це трохи різні підходи. І ще хочу зауважити, наприклад, от використовувались тут щойно такі п'ятимери, і для них робився фактично перебір різних комбінацій. У відповіді на перше питання ви казали, що скейлінгові співвідношення для дуже великих N , вірніше для N до безмежності виконуються, а тим не менше дуже багато робіт має не те що скінченні N , а справді малі N , то чи немає тут протиріччя? Що би ви з того приводу сказали?

Відповідь: Так тут розчинник є неявним. Тут варто зауважити, що саме для відношення між радіусом гірації і гідродинамічним радіусом ми саме з цим і стикнулися, так як була робота з симуляціями на гратці, яка рахувала це відношення для зірок, і в них значення суттєво відрізнялися від теорії в гаусовому наближенні. Автори пробували аргументувати, що саме гаусове наближення дає неправильний результат, і що гідродинамічний радіус так не можна розраховувати. Тим не менше, виявилось, що коли були зроблені симуляції для дуже довгих ланцюжків, то отриманий результат узгоджується з гаусовим наближенням, а проблема була саме в тому, що гідродинамічний радіус дуже повільно виходить на потрібний скейлінг. Порівняння буде неправильним, якщо не було досягнуто правильного скейлінгу.

Д. ф.-м. н., директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України Т. М. БРИК:

Христіно, я маю питання до того слайду де ви пояснювали гідродинамічний радіус. По-моєму, ви сказали таке, що там гідродинамічний радіус має внесок від часу релаксації і від коефіцієнту дифузії.

Відповідь: Тут мова йшла про характеристичну в'язкість, яка залежить від часу релаксації і коефіцієнту дифузії. В той же час час, релаксація містить залежність від квадрату радіусу гірації, а коефіцієнт дифузії від гідродинамічного радіусу, що після спрощення дає вираз, який пов'язує характеристичну в'язкість з розмірними характеристиками.

Д. ф.-м. н., головний науковий співробітник М.П. КОЗЛОВСЬКИЙ:

1) Зі вступу не зрозуміло, яка модель полімеру буде використовуватись?

Відповідь: В даній роботі центральною буде неперервна модель полімеру. Я говорила про неї у вступі, щоб чітко розділити, що було зроблено до нашої роботи, а що є новим.

2) От ви порівнюєте з експериментом, з числовими даними, але що ж ви з ними порівнюєте?

Відповідь: Ми використовуємо модель неперервного ланцюга, в рамках якої для різних архітектур розраховуються радіуси гірації, відношення яких є універсальним і не залежить від деталей ані моделей, ані хімічної структури. Все, що важливо в експерименті – це, щоб полімер був в стані хорошого розчинника, в граткових моделях не було самоперетинів блукань, а в Ланжевенівій динаміці враховувалась відштовхувальна частина потенціалу Ленарда-Джонса. Порівнюємо з симуляціями, оскільки експериментальних результатів доступних є мало.

Д.ф.-м.н., заст. директора з наукових питань Т. М. ПАЦАГАН:

1) Спершу маленький коментар по термінології, я десь побачив в заголовку «гаусове» наближення з двома «с», а в інших місцях з одним. То це варто поправити і тут, і в дисертації. І мабуть мало б бути такі одне «с». І друге – я все ж таки в першому розділі не зрозумів, і Михайло Павлович уточнював. І в другому – я таки не до кінця зрозумів, яка модель? Там, де якісь сполуки – можна було б їх назвати, що це таке. Бо потім мова йде про комп'ютерне моделювання якоюсь динамікою, де є міжчастинкова взаємодія. Яка вона? Де вона описується? Хоч би десь мелькнуло на слайдах. Я може був неуважний, то будь-ласка уточніть. Ну і ще третє питання – про полімерні мережі. В мене вони асоціюються з сітками, гелями, а ви намалювали якісь кусочки графів. Я розумію, що це розглядалось теоретично, але от для загального розуміння – уточніть будь-ласка.

Відповідь: Неперервна модель полімеру – це, коли кожна траєкторія в архітектурі є безмежно тонкою і безмежно довгою. Комп'ютерне моделювання тут, як поправив професор Ільницький, це Ланжевеніна динаміка без взаємодії між кульками, ми маємо жорсткі кульки на пружинах, які коливаються, між якими відсутня взаємодія відштовхування.

2) В чому полягає суть стрижневого алгоритму?

Відповідь: Стрижневий алгоритм на гратці стартує з випадкового блукання без самоперетинів, на якому випадковим чином вибирається вузол, і між цим вузлом і кінцем ланцюжка виконується операція симетрії на гратці, як от до прикладу відбивання відносно площини симетрії. Якщо результуюча траєкторія є теж блуканням без самоперетинів, то маємо нову конформацію. У випадку кільця потрібно зафіксувати два вузли між якими можна провести певну операцію.

3) Чи перевіряли ви вплив ступеня галуження на характерний розмір йоршикових полімерів?

Відповідь: Ми пробували це перевірити, розглядаючи сегменти, які мали б задовольняти потрібну скейлінгову поведінку, але в симуляціях виникає проблема, що макромолекули застрягають в околі підковоподібних конформації і на набір потрібної статистики просто не вистарчало часу. Тому для порівняння використали інші раніше отримані результати.

4) Тобто в рамках комп'ютерного моделювання ця задача залишилась не розв'язаною?

Відповідь: Так

Академік НАН України І. М. МРИГЛОД:

1) Я от бачу перед собою оцей малюнок, де є декорований ланцюг, до якого в певних вузлах прикріплені хвости чи петлі. З фізичної точки зору зрозуміло, що, якщо враховувати розмір мономеру, то такий ланцюг в скейлінговій границі, де оці хвости мають скінченну межу, а межа ланцюга основного безмежна, то він очевидно буде мати ті ж характеристики, що і ланцюг, але з певними ефективними розмірами мономерів, які визначаються оцим декором. Правильно, я міркую чи ні?

Відповідь: Так. В нас виходить безмежна границя тільки тому, що буде безмежна кількість сегментів основи. Тут також важливо враховувати відносні ступені полімеризації елементів.

2) Це важливо для розуміння фізики, бо фактично відповідь, яку ви давали на одне з перших питань відносно зірки і скейлінгу, де ви говорили, що є твердий кор, м'який кор, а десь там в границі знаходиться аналогія з вільним ланцюгом. Тобто я маю на увазі, що ця ділянка твердого кору буде дуже сильно залежати також від розміру мономерів, і в границі буде мабуть ситуація, коли границя твердого кору також зростає. І тут вже цікавий експеримент, так як розмір мономеру визначатиме фізичні межі. Тобто оці речі мені здається з погляду фізики дуже важливі. І я не зовсім зрозумів чи у всіх випадках ви закладаєте розмір мономеру в теорію.

Відповідь: Даний розділ присвячений ідеальним ланцюжкам, коли заборонений об'єм не є включений в модель. Враховується лише вплив архітектури. Всі оці ефекти, про які ви питаєте, коли є твердий кор, гаусова поведінка, хороший розчинник, в даній моделі є невидимі, тому що ланцюжки є гаусовими, і перетини між ними є дозволені. Це буде в майбутніх розділах.

3) Я просто хотів уточнити, коли ми говоримо про скейлінг, то хотілось би знати чи всі скейлінгові границі масштабуються однаково, як для основи, так і для бокових гілок.

Відповідь: Всі гілки прямують до безмежності. Однак, якщо розділити довжину однієї на довжину іншої, то в границі отримаємо константу.

4) В деяких моментах ви говорите, що ваша теорія гірше працює ніж комп'ютерний чи реальний експеримент. Хотілось би знати ступінь довіри до кожного способу пізнання природи. І от я власне не почув чи в ланжевенівській динаміці використовувався скінченно розмірний скейлінг, який дозволяє уточнити дані отримані для скінченних систем.

Відповідь: Тут мені доведеться зупинитись на кожній задачі окремо. У випадку розеткових полімерів як для стрижневого алгоритму, так і для ланжевенівської динаміки розглядався скінченно розмірний скейлінг, з тим, що у випадку ланжевенівської динаміки брались ланцюжки до 3000 мономерів. У випадку пом-пом полімеру в дисипативній динаміці розглядались фіксовані довжини ланцюжків, але відомо що для таких довжин вже спостерігається коректна скейлігнова поведінка.

Академік НАН України Ю.В.ГОЛОВАЧ:

1) Ви згадали метод Вея. Можна про нього в двох словах?

Відповідь: Не сильно вникаючи в деталі методу. Тут найважливіше сказати, що на зображеннях мереж між вузлами є не один мономер, а довгий ланцюжок, і вузли фактично є центрами галуження.

2) В тій задачі, де ви говорите про форму полімерів з двома центрами галуження. Там спостерігається максимум при відносному ступені полімеризації «два». Чи є за тим якась очевидна причина?

Відповідь: Очевидної причини немає

К.ф.-м.н., науковий співробітник Р.В.РОМАНІК:

В мене питання щодо термінології. Я коли почув розеткові полімери, то в мене виникла асоціація з розетками, але коли я побачив зображення то зрозумів що мабуть від слова gorse, тобто троянда. Моє питання: може краще було б квідкоподібні полімери, чи щось таке?

Відповідь: Термін пропонувався не мною. Він був запропонований в 2015 році Вікторією Блавацькою і Ральфом Мецлером. Я автоматично використовую англійський термінів роботі. Над можливим українським варіантом треба подумати.

Д.ф.-м.н., головний науковий співробітник М.В. ТОКАРЧУК:

1) Мені здається, що тут в'язкість є тензорною характеристикою, а полімери належать до неньютонівських рідин. Тому, як тут обгрунтовується використання співвідношення Стокса?

Відповідь: В даному випадку мова йде про сильно розведені розчини, для яких взаємодіями між макромолекулами можна знехтувати, так як вони є рідкісними. Саме в цій обмеженій області концентрацій є допустиме використання співвідношення Стокса.

Д.ф.-м.н., старший науковий співробітник А. С. ВДОВИЧ:

При якій температурі проводились розрахунки та як залежать від температури радіус гірації, асферичність, інші характеристики?

Відповідь: В даному випадку говоримо про конформаційну теорію, для якої температура як така відсутня. В чисельному моделюванні говоримо про режим хорошого розчинника, тобто температура є достатньо високою, щоб макромолекула була в стані набухлого клубка. Загалом, радіус гірації має більше значення у випадку хорошого розчинника і майже не залежить від температури, далі він різко спадає при певній температурі. Посередині цієї області є так званий тета-розчинник, коли взаємодії відштовхування і притягання є зрівноваженими. Після цього настає інше плато, де полімер є в режимі колапсу.

Д.ф.-м.н., професор, член-кор. НАН України, головний науковий співробітник М.Ф. ГОЛОВКО:

1) Ви так вільно говорите «експериментальні дані» і так далі, а треба було би сказати, які це експерименти, що вимірюється, якими методами?

Відповідь: У вступі, я згадувала що радіус гірації вимірюється в статичному розсіянні світла. Там залежність інтенсивності розсіювання світла від кута розсіяння апроксимується добре відомою для цього випадку кривою, звідки отримуються значення вагово усередненої молекулярної маси, радіусу гірації та другого віріального коефіцієнту.

2) Кожен експеримент має певні межі точності і то також треба враховувати.

Відповідь: Експериментальні дані брались з таблиць опублікованих в статтях, де були приведені або значення радіусів гирації або вже розраховані експериментаторами значення універсальних відношень. На жаль, можливості поспілкуватись з експериментаторами і вияснити ці питання більш детально не було.

3) Наскільки я пам'ятаю з вимог до докторської дисертації, то має бути або розв'язана нова проблема, або якась визначна задача. Тут питання – що дисертант вважає, чи це нова проблема чи вирішена задача?

Відповідь: Тут доволі складно сказати. Історично ту є певне вікно. Про ці параметри і взаємодії багато говориться в літературі приблизно до половини 90-х років. Тоді є вікно в цих обговореннях. З'являються нові архітектури, а розширення цих теорій на нові архітектури не було зроблено до нас. Ми вертаємось до однієї з класичних моделей і продовжуємо її для випадку нових об'єктів. Ще один момент – це, що саме в наших роботах пропонується системний підхід до аналітичного розрахунку гідродинамічного радіусу.

3. ВИСТУПИ ПРИСУТНІХ

З оцінкою дисертаційної роботи Х.А. Гайдуківської, наукового співробітника відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем, виступили рецензенти

1. Д.ф.-м.н., заст. директора з наукових питань **Т. М. ПАЦАГАН**: В цілому робота є дуже добре, на мою думку, зроблена, ґрунтовна. І тут, в значній мірі, великий є плюс, що зараз по нових правилах можна захищатися з меншою кількістю статей. Робота цілісна і, в значній мірі, самодостатня. Є системно все викладено. Представлення роботи сьогодні було гарне. Але, на мою думку, його треба було адаптувати для кращого сприйняття ширшому колу аудиторії. Стосовно висновків, то дуже в них бракує результату. Не ясно, що було отримано. Зрозуміло, що це теоретична фізика, тут розвиваються методи, значна частина результатів – це самі розроблені методи, чи по новому застосовані методи. Але, в кінці кінців, ми фізики і хочемо зрозуміти, що ми отримали, які нові знання або підтвердження.

Підсумовуючи, результати отримані задовольняють вимогам і заслуговують на представлення у вигляді докторської дисертації по фізико-математичних науках. Однак, вагомі зауваження до роботи таки треба врахувати. А загалом – я роботу підтримую і бажаю успіху.

2. Д.ф.-м.н., провідний науковий співробітник **А. Б. БАУМКЕТНЕР**: Загалом, робота на мене справила дуже хороше враження. Є багато результатів, багато статей і, очевидно, що об'єм отриманих результатів і вплив цих результатів на майбутні дослідження. Безумовно, доповідач заслуговує на присвоєння ступені доктора наук. Разом з тим, я би ще додавив, що над метою і висновками ще треба попрацювати.

3. Д.ф.-м.н., професор, провідний науковий співробітник **Ю.В.КАЛЮЖНИЙ**: Робота пророблена велика. І я думаю, що її варто висувати на захист. Ця робота є цікава тим, що вивчаються об'єкт з погляду універсальних характеристик. Цікаво було б знайти зв'язок між цим методом і більш детальними описами в теорії рідин.

З оцінкою дисертаційної роботи виступили також присутні на фаховому семінарі.

Д. ф.-м. н., академік НАН України, головний науковий співробітник **І. М. МРИГЛОД**: Насамперед, хочу нагадати, що мова йде про надзвичайно складні об'єкти, непросту фізику і, хоч ділянка не є зовсім нова, мені здається, що вона все таки продовжує розвиватись. Зрозуміло, що виникають питання застосовності формул, але такі питання виникають в науці загалом часто, як до теорії, так і до експерименту, оскільки кожне просування вперед вимагає спрощень, аналогій і інколи вони можуть і не співпадати. Мені здається, що є хороша робота, є отримана низка цікавих результатів, розглянуті дуже непрості задачі. У випадку теорії є складність у проведенні межі між теорією і фізичним світом. В цій доповіді цей поділ не завжди чітко звучав. І в тексті роботи, і в майбутніх доповідях я б порадив ці відмінності між моделями і реальним світом формулювати чіткіше. А загалом, я думаю, що є з чим виходити на захист. Доповідач показав, що має високу загальну ерудицію. На мою думку, маємо справу з завершеним дослідженням, де є все, що вимагається. Я думаю, що семінар має всі підстави, щоб рекомендувати роботу до наступного етапу

Д.ф.-м.н., завідувач відділу **Я.М. ІЛЬНИЦЬКИЙ**: Христина стала глибоким фахівцем в області теорії галуужених полімерів. А також останнім часом займається комп'ютерним моделюванням. Тому, робота виконана на дуже високому технічному рівні. Ми судимо про роботу, виходячи з цього виступу. Тому, ми не знаємо, як точно в роботі сформульовані деякі речі. В доповіді є багато деталей, але хотілось би трошки більше узагальнень. В кінці дисертації вартувало б зробити певні узагальнення, щоб була якість завершеної наукової роботи, а не компіляції. У доповіді хотілось би трохи більше почути про практичні значення того, що рахувалось. Я також вважаю, що робота є на високому рівні. Але згадані сьогодні зауваження треба обов'язково врахувати в дисертації для того, щоб це була дійсно цілісна робота.

Д. ф.-м. н., директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України **Т. М. БРИК**: Дуже приємно, що в нас в інституті оцей напрямок теорії полімерних систем продовжується. Доповідач показала сьогодні, що вже є хорошим спеціалістом по цьому напрямку і дуже радує, що є так багато аналітичних результатів. Є порівняння з комп'ютерними симуляціями. Я абсолютно підтримую цю дисертацію, вважаю що це є закінчена робота, і готовий її підтримати до захисту

Д.ф.-м.н., професор, член-кор. НАН України, головний науковий співробітник **М.Ф.ГОЛОВКО**: Ми прослухали гарну роботу. Є цікаві нові результати. Є технічні зауваження щодо формулювання висновків. Можливо варто підправити мету роботи. А в цілому, тут є складні молекули, є теорія є моделі, наближення, обговорюються різні комп'ютерні методи. Я думаю, що цей комплекс різних підходів свідчить про кругозір дисертантки. Я підтримую, щоб роботу представити як докторську дисертацію, але висновки таки варто поправити.

Академік НАН України **Ю. В. ГОЛОВАЧ**: Ми бачили результат, але частина з нас знає те, що було за кадром. Результат – це 14 гарних робіт з потужними відомими вченими, як співавторами, і з молодими вченими. В роботі поєднані потужні аналітичні і чисельні підходи, що є рисою успадкованою від пані Вікторії, що є дуже приємно. Вітаю вас з сьогоднішнім виступом і, на підставі виступів рецензентів, бажаю вам успіху в подачі. І, надіюсь, до літа в інституті буде ще один здібний доктор наук.

Виступаючі при обговоренні дали позитивну оцінку дисертаційній роботі, підтвердили актуальність розв'язаного наукового завдання: дослідження характеристик розміру і форми полімерних структур. Представлена дисертаційна робота Х.А. ГАЙДУКІВСЬКОЇ відповідає кваліфікаційним вимогам, відповідає спеціальності 01.04.02 – “теоретична фізика”, і може бути рекомендована для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді з урахуванням правок рекомендованих семінаром. Присутні на засіданні обговорили проект висновку, підготовлений рецензентами: д.ф.-м.н., заступником директора з наукових питань **Т.М. ПАЦАГАНОМ**, д.ф.-м.н., провідним науковим співробітником **А.Б. БАУМКЕТНЕРОМ** д.ф.-м.н., провідним науковим співробітником **Ю.В.КАЛЮЖНИМ**.

З характеристикою дисертанта виступив науковий консультант д. ф.-м. н., завідувач лабораторії **В. Б. БЛАВАЦЬКА**:

Я хотіла б підтримати роботу доповідача. Ми з нею безпосередньо працюємо вже досить довгий час. Хочу відмітити, що Христина є дуже самостійним дослідником, зі щирою цікавістю до роботи. На мою думку, важливим внеском роботи є прорив в методі прямого полімерного перенормування, який узагальнює його на випадок складногалужених полімерів. Цей підхід є дуже потужним, але до цього його використовували лише для доволі простих структур. Є багато результатів. Для деяких з розглянутих структур є безпосередній зв'язок з експериментом. Загалом вважаю, що робота заслуговує на подання на захист, і її в цьому повністю підтримую.

4. ЗАСЛУХАВШИ ТА ОБГОВОРІВШИ ДОПОВІДЬ Христини Аркадіївни ГАЙДУКІВСЬКОЇ, а також за результатами попередньої експертизи представленої дисертації на фаховому семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України, прийнято наступні висновки щодо дисертаційної роботи “Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур”.

Висновок

про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації “Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур” здобувача ступеня доктора фізико-математичних наук Христини Аркадіївни ГАЙДУКІВСЬКОЇ за спеціальністю 01.04.02 – “теоретична фізика”

4.1. Актуальність теми дисертації

Відкриття нових методів синтезу полімерних макромолекул в останні десятиліття простимулювало появу нових складних полімерних структур з чітко окресленою архітектурою, а вдосконалення методів фільтрації дозволило отримувати їх монодисперсні зразки. Питанням архітектури в синтезі приділяється значна увага. З одного боку, у розробці матеріалів для нових застосувань (адресна доставка ліків, інкапсуляція барвників, очищення білків, утворення нанокристалів, створення світловипромінюючих матеріалів, матеріалів для покриття поверхонь, в діагностиці з використанням біозображень, інженерія біологічно сумісних тканин, біоклеїв та інше), з іншого боку – пошук дружніх до навколишнього середовища матеріалів для традиційних застосувань.

Найчастіше, коли мова йде про полімери в практичних застосуваннях, маємо справу з полімерними розплавами, які є концентрованими. Разом з тим, інтерес до сильно розведених розчинів також не є суто теоретичним, оскільки макромолекули можуть використовуватися також як модифікатори в'язкості. Як і в усіх випадках полімерних матеріалів, архітектура відіграє одну з центральних ролей у в'язкоеластичних властивостях. Тут також варто зазначити, що архітектура модифікаторів впливає на тривалість застосування таких розчинів (до прикладу мастил), так як вона впливає, в тому числі, і на швидкість руйнування макромолекул. Відомо, що як кільцеві, так і галуженні полімери характеризуються значно нижчою в'язкістю в розчині у порівнянні з їх лінійними аналогами, і вона також знижується зі зростанням ступені галуження.

Однією із переваг сильно розведених розчинів полягає у можливості експериментального дослідження властивостей архітектури молекул, нехтуючи безпосередньою взаємодією між ними, оскільки в таких розчинах ці молекули знаходяться далеко одна від одної. Це, в свою чергу, дозволяє вивчати кожен макромолекулу окремо та отримувати детальне розуміння її конформаційних властивостей. Це в подальшому сприятиме ефективнішому узагальненню отриманих знань на випадок макромолекул в розплавах і концентрованих розчинах.

4.2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами інституту та відділу

Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України. Представлені в дисертації результати отримані згідно з планами робіт в рамках бюджетних тем НАН України: "Вплив молекулярної структури і процесів локального впорядкування на фізичні властивості багаточастинкових систем" (2014-2018 рр., номер держреєстрації 0114U001048), "Процеси впорядкування і властивості багаточастинкових статистичних систем: Теорія і комп'ютерне моделювання" (2019-2023 рр., номер держреєстрації 0119U100663), "Структурутворення та динаміка в м'якій речовині: комп'ютерне моделювання та теоретичний аналіз", (2024-2028 рр., номер держреєстрації 0124U001505), а також тем "Нові концепції статистичного опису і їх застосування у теорії багаточастинкових систем" (2017-2021 рр., номер держреєстрації 0117U002093), "Форми складних полімерних макромолекул: теорія та моделювання", 2017-2018 рр., номер держреєстрації 0117U006391).

4.3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

У спільних публікаціях автору дисертації належить:

- розрахунок розмірних характеристик складногалужених полімерів в межах неперервної моделі;
- імплементація та застосування стрижневого алгоритму до складногалужених полімерів;
- формулювання алгоритму розрахунку гідродинамічного радіусу та його застосування;
- проведення чисельного моделювання методом ланжевенівської динаміки для гантелькових і сніжинкових полімерів;

Автор брав безпосередню участь в обговоренні всіх результатів, опублікованих у спільних дослідженнях.

4.4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором рішень, висновків, рекомендацій

Отримані результати для полімерів в околі тета-точки (ідеальні ланцюжки) були розраховані точно. Розрахунок радіусів гірації для складних полімерів виконувався в рамках неперервної моделі полімеру з використанням теорії збурень за константами взаємодії та методу прямого полімерного перенормування. Результати проведених розрахунків за допомогою теорії узгоджуються з результатами, отриманими в рамках чисельного моделювання (Ланжевенівська динаміка, дисипативна динаміка, Монте-Карло). Наукові положення, висновки та рекомендації, сформульовані у дисертації, повністю обґрунтовано теоретичним аналізом.

4.5. Ступінь новизни основних результатів дисертаційної роботи порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Наукова новизна отриманих результатів полягає у: 1) розширенні застосування неперервної моделі полімеру на випадки складногалужених архітектур; 2) точний розрахунок гідродинамічного радіусу для ідеальних складногалужених полімерів. За результатами дисертаційної роботи вперше:

- проаналізовано вплив виключеного об'єму на розмірні характеристики складногалужених полімерів (топології пом-пом, розетки, гантелі)
- проаналізовано вплив відносної довжини структурних елементів складних полімерних архітектур з двома і більше центрами галуження на їх універсальні властивості
- показано незалежність скейлінгових показників, що визначають ефективний розмір складно-галужених блок-кополімерів, від типу взаємодії між мономерами на різних сегментах.
- проаналізовано вплив взаємодії між мономерами на характерний розмір розеткових полімерів.

4.6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

За матеріалами дисертації опубліковано 28 наукові праці, з них: 14 стаття у фахових наукових виданнях та 14 теза конференцій.

СТАТТІ:

1. K. Haydukivska, V. Blavatska. Probability of loop formation in star polymers in long range correlated disorder, *J. Chem. Phys.*, (2017), vol.146, 184904
2. K.Haydukivska, V. Blavatska. Universal size properties of a star-ring polymer structure in disordered environment *Phys. Rev. E*, (2018), vol.97, 032502.
3. O. Kalyuzhnyi, K.Haidukivska, V.Blavatska, and J.Ilnytskyi, Universal Size and Shape Ratios for Arms in Star-Branched Polymers: Theory and Mesoscopic Simulations, *Macromol. Theory Simul.* (2019), vol.28, 1900012
4. V. Blavatska, K.Haydukivska, Universal features of complex n-block copolymers *J. Phys. A: Math. Theor.* (2019), vol.52, 505004;
5. V. Blavatska, K. Haydukivska and Yu. Holovatch. Shape analysis of random polymer networks, *J. Phys.: Condens. Matter*, (2020), vol.32, 335102;
6. K. Haydukivska, V. Blavatska, J. Paturej, Universal size ratios of Gaussian polymers with complex architecture: radius of gyration vs hydrodynamic radius, *Sci Rep*, (2020), vol.10, p. 14127;

7. K. Haidukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, and J. Ilnytskyi, On the swelling properties of pom-pom polymers in dilute solutions. Part 1: symmetric case, *J.Mol.Liq.*, (2021), vol. 328, 115456;
8. K. Haydukivska, V. Blavatska, J.Klos, J. Paturej, Conformational properties of star-shaped macromolecules consisting of linear and ring arms, (2022), *Phys Rev E*, vol. 105, 034502;
9. K.Haydukivska, V. Blavatska. Toy models of multibranched polymers: opened vs. circular structures, *J. Phys. A: Math. Theor.* (2022), vol. 55, 145001
10. K. Haydukivska, O. Kalyuzhnyi, V. Blavatska, and J. Ilnytskyi, Swelling of asymmetric pom-pom polymers in dilute solutions, *Condensed Matter Physics*, (2022), vol. 25, 23302
11. K. Haydukivska, V. Blavatska, On the swelling properties of pom-pom polymers: impact of backbone length, *Condensed Matter Physics*, (2023), vol. 26, 23301;
12. K.Haydukivska, V. Blavatska, J.Paturej. Molecular conformations of dumbbell-shaped polymers in good solvent, *Phys Rev E*, (2023), vol. 108, 034502;
13. K. Haydukivska, V. Blavatska, J.Paturej, The size and shape of snowflake-shaped polymers in dilute solution: Analytical and numerical approaches, *J.Mol.Liq.*, (2023), vol.392, 123430;
14. K. Haydukivska, V. Blavatska, Universal properties of branched copolymers in dilute solutions, *Condensed Matter Physics*, (2024), vol. 27, 13301;

ТЕЗИ КОНФЕРЕНЦІЙ:

15. X. Гайдуківська, В. Блавацька, Ймовірності утворення петель в зіркових полімерах, 17-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: в збірнику тез – Львів: 8-9 червня, 2017. - с.28.
16. K.Haydukivska, V. Blavatska. Partially directed polymers in anisotropic environment, *Ulam computer Simulations Workshop: Challenges & Opportunities in Molecular Simulations: In Book of abstracts – Lviv: June 21-24, 2017*, P.58.
17. K.Haydukivska, V. Blavatska. Shape characteristics of partially directed polymers in anisotropic environment, 18th International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics: In Book of abstracts – Leipzig: November 30 – December 2, 2017, P.22.
18. K.Haydukivska, V. Blavatska. Universal properties of complex polymers with more than one branching point. Workshop on current problems in physics: In Book of abstracts – Lviv: July 03-04, 2018, P.6.
19. X. Гайдуківська, В. Блавацька, Універсальні характеристики галужених полімерів, 19-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: в збірнику тез – Львів: 13-14 червня, 2019. - с.29.
20. K.Haydukivska, V. Blavatska, Universal features of complex n-block copolymers, 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications: Book of abstracts. – Lviv, Ukraine: 3-6 July 2019. – P. 111.
21. V. Blavatska, K.Haydukivska, Universal features of complex n-block copolymers *J. Phys. A: Math. Theor.* (2019), 52(50), 505004.
22. X. Гайдуківська, В. Блавацька. Розмірні характеристики складногалужених полімерів, Різдвяні дискусії: в збірнику тез – Львів: 09-10 січня, 2020.
23. X.Гайдуківська, В. Блавацька. Розмірні характеристики гіпергалужених полімерів. В збірнику тез: 20-ї Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 15-16 жовтня 2020).

24. K.Haydukivska, V. Blavatska. Ring polymers on percolation cluster. In Book of abstracts: 20th International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics (Leipzig, December 3-5, 2020).
25. K.Haydukivska, V. Blavatska. Size Characteristics for the Hyperbranched Polymers, XI Young Scientists Conference Problems of Theoretical Physics: Book of abstracts. – Kyiv, Ukraine: 21-23 December 2020, P.62
26. K.Haydukivska, V. Blavatska. MECO46 Simple models for complex polymers: hyperbranched polymers, 46th Conference of Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46): Book of abstracts. – Riga, Latvia: 11-12 May 2021. – P.104
27. Х.Гайдуківська, В. Блавацька, Я. Патурей. Гантелькові полімери: аналітичний і чисельний опис. В збірнику тез: 22-ї Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 24-25 листопада 2022)
28. K.Haydukivska, V. Blavatska, J.Paturej. Predicting universal size ratios for complex polymers. Workshop on current problems in physics: In Book of abstracts – Lviv: October 26–27, 2023, P.7.

4.7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо

Результати досліджень було представлено на таких конференціях: Ulam computer Simulations Workshop: Challenges & Opportunities in Molecular Simulations (Lviv, Ukraine, 2017); 18th International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics (Leipzig, Germany, 2017); Workshop on current problems in physics (Lviv, Ukraine, 2018); 19-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 2019); 5th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications (Lviv, Ukraine, 2019); Різдвяні дискусії (Львів, Україна, 2020); 20-ї Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 2020); 20th International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics (Leipzig, Germany, 2020); XI Young Scientists Conference Problems of Theoretical Physics (Kyiv, Ukraine, 2020); 46th Conference of Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO46) (Riga, Latvia, 2021); 22-й Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 2022); Workshop on current problems in physics (Lviv, Ukraine, 2023), а також на семінарах "Статистична фізика складних систем" Інституту фізики конденсованих систем НАН України та семінарах відділу комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

4.8. Наукове значення використаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів в програмі навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

Центральною віссю роботи є узагальнення неперервної моделі полімерів для опису складних полімерних архітектур з двома і більше центрами галуження в сильно розведених розчинах. Структурно показано методику узагальнення статистичної суми на випадок складних архітектур.

В роботі вперше запропоновано алгоритм розрахунку гідродинамічного радіусу в рамках неперервної моделі, який дозволяє отримати точні значення для гідродинамічних радіусів ідеальних полімерів зі складною архітектурою. Показано, що цей алгоритм розрахунку працює у всіх випадках, в яких застосовний алгоритм де Клуазо для визначення радіусу гірації.

4.9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства, або галузі народного господарства, де вони можуть бути застосовані

Отримані в роботі числові значення для універсальних розмірних характеристик складногалужених макромолекул в хорошому розчиннику можуть бути в подальшому використані при описі гідродинамічних та в'язко-еластичних властивостей полімерних розчинів. Результати отримані для ідеальних полімерних структур є важливими, оскільки можуть знаходити застосування для подальшого аналізу властивостей концентрованих полімерних розчинів та розплавів. Вони також можуть використовуватись для прогнозу характеристичних масштабів в самоорганізованих матеріалах.

4.10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація має логічну структуру. Дисертаційна робота складається із вступу, семи розділів, основних положень дисертації, списку використаних джерел. Стель та мова дисертації не викликають суттєвих зауважень.

Дисертаційна робота за структурою, мовою та стилем викладання відповідає вимогам Міністерства освіти і науки України.

У ході обговорення дисертації до здобувача не було висунуто жодних зауважень щодо суті самої роботи.

4.11. Відповідність дисертації паспорту спеціальності, за якою вона представлена до захисту

Дисертація є самостійною науково-дослідною роботою. Робота є актуальною, і виконана на високому науковому рівні. Автор має ґрунтовну теоретичну підготовку й необхідні професійні знання. Робота відповідає спеціальності 01.04.02 – “теоретична фізика”.

5. З урахуванням вищезазначеного, на фаховому семінарі зі спеціальності 104 – “Фізика і астрономія” Інституту фізики конденсованих систем НАН України ухвалили:

1. Дисертаційна робота Христини Аркадіївни ГАЙДУКІВСЬКОЇ на тему “Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур” є завершеною науковою працею, у якій розв’язані актуальні наукові завдання: 1) аналіз впливу архітектури на характерний розмір складногалужених макромолекул, 2) аналіз впливу взаємодії між мономерами на характерний розмір макромолекул, 3) точний розрахунок гідродинамічного радіусу для складногалужених полімерів в гаусовому наближенні, 4) якісна оцінка ступеня розтягування структурних елементів під впливом галуження, 5) аналіз скейлінгових властивостей для складногалужених кополімерів. Ці результати відповідають спеціальності 01.04.02 – “теоретична фізика” та мають важливе значення для галузі 10 – “природничі науки”.


2. Матеріали дисертації Х.А. Гайдуківської повністю висвітлено у 28 наукових публікаціях, з них 14 статей включено до міжнародних наукометричних баз.
3. Дисертація Х.А. Гайдуківської відповідає вимогам "Порядку присудження та позбавлення наукового ступеня доктора наук" затвердженого постановою КМУ від 17 листопада 2021 р. № 1197, наказів МОН України № 1220 від 23.09.2019 р. "Про опублікування результатів дисертацій на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук" та № 40 від 12.01.2017 р. "Про затвердження вимог до оформлення дисертації".
4. З урахуванням високого фахового рівня Х.А. Гайдуківської, дисертаційна робота "Характеристики розміру та форми в статистичному описі полімерних структур" є завершеним науковим дослідженням і рекомендується для подання до розгляду та захисту на спеціалізованій вченій раді.

Головуючий на засіданні фахового семінару,
доктор фізико-математичних наук,
академік НАН України


Ю.В.ГОЛОВАЧ

Рецензенти:

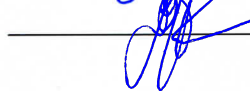
доктор фізико-математичних наук,
заступник директора з наукових питань,


Т.М.ПАЦАГАН

доктор фізико-математичних наук,


А. Б. БАУМКЕТТЕР

доктор фізико-математичних наук,


Ю.В.КАЛЮЖНИЙ