

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор Інституту фізики
конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України
чл.-кор. НАН України _____ Т.М.Брик

"16" _____ 2026 р.



**Результати обговорення та проведення презентації дисертаційної
роботи Назара Кукаркіна та висновок про наукову новизну,
теоретичне та практичне значення результатів дисертації**

ВИТЯГ

з протоколу № 1297 фахового семінару

Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України
від 02.07.2026 р.

1. ПРИСУТНІ 38 працівників Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, а саме:

1. Остап Романович БАРАН, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
2. Вікторія Богданівна БЛАВАЦЬКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач лабораторії статистичної фізики складних систем
3. Тарас Михайлович БРИК, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, директор Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України
4. Галина Анатоліївна БУТОВИЧ, доктор філософії, молодший науковий співробітник
5. Андрій Степанович ВДОВИЧ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
6. Олег Володимирович ВЕЛИЧКО, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
7. Тарас Михайлович ВЕРХОЛЯК, доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу квантової статистики
8. Христина Аркадіївна ГАЙДУКІВСЬКА, доктор фізико-математичних наук, науковий співробітник
9. Тарас Валентинович ГВОЗДЬ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
10. Тарас Юрійович ГОЛОВАЧ, доктор філософії, молодший науковий співробітник
11. Юрій Васильович ГОЛОВАЧ, доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, головний науковий співробітник

12. Мирослав Федорович ГОЛОВКО, доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, головний науковий співробітник
13. Юліан-Іван-Михайло Назарович ГОНЧАР, доктор філософії, молодший науковий співробітник
14. Тарас Ігорович ГУТАК, доктор філософії, докторант, молодший науковий співробітник
15. Оксана Андріївна ДОБУШ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
16. Юрій Ігорович ДУБЛЕНИЧ, кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник
17. Максим Леонідович ДУДКА, доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем
18. Ілля-Микола Анджейович ІЛЕНКОВ, доктор філософії, молодший науковий співробітник
19. Юрій Володимирович КАЛЮЖНИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник
20. Михайло Павлович КОЗЛОВСЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник
21. Марія Іванівна КОПЧА, доктор філософії, молодший науковий співробітник
22. Марія Ярославівна КОРВАЦЬКА, молодший науковий співробітник
23. Іван Ярославович КРАВЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
24. Володимир Олександрович КРАСНОВ, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
25. Тарас Євстахійович КРОХМАЛЬСЬКИЙ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
26. Олеся Михайлівна КРУПНІЦЬКА, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
27. Ігор Миронович МРИГЛОД, доктор фізико-математичних наук, академік НАН України, головний науковий співробітник
28. Оксана Вадимівна ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник
29. Тарас Миколайович ПАЦАГАН, доктор фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи, завідувач відділу теорії м'якої речовини
30. Ігор Васильович ПИЛЮК, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник
31. Роман Васильович РОМАНІК, кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
32. Роман Ярославович СТЕЦІВ, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
33. Андрій Дмитрович ТРОХИМЧУК, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник

34. Дмитро Юрійович ШАПОВАЛ, доктор філософії, молодший науковий співробітник
35. Андрій Михайлович ШВАЙКА, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник
36. Микола Адріанович ШПОТ, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
37. Юрій Григорович ЯРЕМКО, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник
38. Дмитро Любомирович ЯРЕМЧУК, доктор філософії, докторант, молодший науковий співробітник

З присутніх – 19 докторів наук, 8 доктори філософії та 10 кандидатів наук (фахівців за профілем поданої дисертації). Голова засідання – доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України, головний науковий співробітник Ю. В. ГОЛОВАЧ.

2. СЛУХАЛИ доповідь аспіранта відділу теорії м'якої речовини Кукаркіна Назара Борисовича за матеріалами дисертаційної роботи “Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів”, поданої на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – “Фізика та астрономія”.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи, завідувач відділу теорії м'якої речовини Тарас Миколайович ПАЦАГАН.

Тему дисертації затверджено 11 червня 2026 року на засіданні вченої ради Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України протокол №64.

Робота була виконана у відділі теорії м'якої речовини Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України.

Після доповіді були поставлені запитання, на які доповідач дав правильні та ґрунтовні відповіді:

Д. ф.-м. наук, професор Козловський М.П.:

1) Назаре, я хотів таке запитати. Я ніде не чув про притягання. Тобто це є система твердих об'єктів, у якій є тільки відштовхування, чи є якесь притягання?

Відповідь: Так, це система твердих частинок, між якими лише відштовхування.

Член-кореспондент НАН України М. Ф. Головка:

1) Я хотів запитати відносно першого висновку. Коли L дорівнює $11/12$. Що це означає? Це означає, що коли ви порівнюєте циліндр (сфероциліндр) з димерами, то виключений об'єм при L , що дорівнює $11/12$, є однаковий, чи як?

Відповідь: Так, ми прирівнювали виключені об'єми. При L сфероциліндра $11/12 L$, виключений об'єм є таким самим, як і у димера.

Академік НАН України І. М. Мриглюд:

1) Назаре, я хотів вас запитати щодо ще одного ефекту, який, можливо, має вплив на структурні властивості – скажімо, парних функцій розподілу. Мова йде про те, що ви враховуєте гнучкість. Якщо би я описував модель таких частинок, то зрозуміло, що гнучкий ланцюг буде мати зокрема і коливні ступені вільності. Тобто в динаміці, залежно від того, які коефіцієнти жорсткості, буде мати значення також і те, як впливають коливні ступені вільності. Чи я помиляюся?

Відповідь: Через те, що ми розглядаємо абсолютно гнучкий ланцюг ми не враховуємо те, що він може мати якусь жорсткість, і те, що розподіл кутів, які дозволені, може бути нерівномірним. А в загальному випадку – так, жорсткість буде мати на це вплив.

2) Я маю на увазі, що коливні ступені вільності також дозволяють змінюватися відстаням між мономерами. У ланцюгу ми можемо визначити, скільки загалом ступенів вільності система має, якщо мономери однакового розміру і маси. Тобто можна провести повну класифікацію. І тоді будуть коливні моди, які, скажімо, у димерів будуть описувати також коливання першого і другого мономера. Якщо вони повільні — це одне, якщо вони швидкі – це інше.

Відповідь: Так, це можна пробувати враховувати.

3) Хотів звернути також увагу, що багато для опису таких твердотільних частинок, зокрема молекулярної динаміки, зробив свого часу Ігор Петрович Омелян, можливо, децьо це доцільно згадати.

Академік НАН України Головач Ю.В.:

1) Що з тими частинками, які ви називаєте матрицею? Яка є парна кореляційна функція матриця-матриця? Як вони розподілені? І що означає ϕ дорівнює 0.9 ? Який об'ємний вклад тих частинок у цю систему?

Відповідь: Матриця — це є сукупність нерухомих сферичних частинок, вони є тверді, вони вдвічі більші за розміри сегментів димера і вони розташовані випадковим чином.

2) Добре, дякую. От власне, коли були ці малюнки, ви весь час казали “це об’ємна фаза” – це малося на увазі, що коли немає домішок. І є фаза в матриці. Якщо здалеку на ті графіки подивитися, то видно, що вони подібні, хоча є певні тонкі відмінності, на які ви звертали увагу. А що буде, якщо збільшувати кількість матричних частинок? Чи ви пробували робити її більш суттєвою? Чи ви працюєте дуже далеко від порогу протікання для цієї матриці?

Відповідь: Ми досліджували два значення пористості, які відповідають упаковкам 0.05 та 0.1. Тут представлені результати тільки для випадку 0.1, оскільки у випадку меншої пористості (більшої упаковки) результати аналогічні. Ми проводили дослідження в різному діапазоні густин саме плин у матриці, де є достатньо простору. Насправді, якщо врахувати виключений об’єм частинок матриці, то поріг протікання для них буде якраз приблизно 0.1.

Д. ф.-м. наук, директор інституту Брик Т.М.:

1) Назаре, ще таке питання. От ви згадували, що коли ви рахували парні функції розподілу у випадку з’єднаних сфер, то ви від крайньої сфери відраховували. А у випадку сфероциліндра, де є той центр, від якого ви відраховуєте парні функції розподілу?

Відповідь: У його напівсферичній шапці. Ми звідти рахуємо. У цьому випадку центр взаємодії зміщений відносно центру сфероциліндра.

Член-кореспондент НАН України М. Ф. Головка:

1) Ігор Миронович задав питання відносно коливних ступенів вільності. Я хотів би додати, що є дві можливості при розгляді таких молекулярних систем. Це може бути, коли весь ланцюг розглядається як окрема частинка, і тоді ми переходимо до координат центра тієї частинки. І ще там є інші моди, які можуть бути коливними, і внутрішніми обертальними і так далі. Я так зрозумів, що ви розглядаєте інший підхід – так званий атом-атомний підхід. Англійською мовою кажуть site-site підхід. То коли кожна частинка розглядається як окрема частинка, яка з’єднана з якоюсь іншою частинкою, і тому там виникають ще внутрішньомолекулярні функції розподілу. Чи не так? Бо тоді немає коливних ступенів вільності. І в атом-атомному підході кожна частинка має три ступені вільності. Але крім того вони зв’язані.

Відповідь: Ми рахували радіальні функції розподілу між сегментами частинок і мономерами.

2) То це фактично є атом-атомні функції розподілу?

Відповідь: Так.

Д. ф.-м. наук, професор Трохимчук А.Д.:

1) Ви показували графіки, і у вас всюди фігурують контактні значення. Чому вони є важливі і для чого їх потрібно рахувати?

Відповідь: Контактні значення є важливими для системи відліку. Вони використовуються в термодинамічній теорії збурень Вертгайма. Наприклад, для того щоб описувати більш складні системи. Зокрема, внесок, який відповідає за асоціацію, описується через використання саме контактних значень. І у випадку, коли ми розглядаємо не просто тверді сфери, а такі, як наші, вони дають розуміння того, як контактне значення змінюється в порівнянні зі сферами. Це дозволяє краще описувати складніші молекулярні системи, як, наприклад, іонні рідини чи суміші полімерів і мономерів.

2) Контактні значення мають якесь відношення до термодинаміки? Чому це важливо для властивостей системи?

Відповідь: Так, тому що воно входить у константу асоціації, яка, у свою чергу, входить у вільну енергію, і так можна вийти на термодинаміку.

Член-кореспондент НАН України М. Ф. Головка:

1) Я хотів, щоб більш чітко було сказано, як розрізнити гнучкість і жорсткість ланцюгів. Жорсткі – це зрозуміло: якщо це ланцюг, то він прямолінійний і не згинається. Але як ви вводите гнучкість ланцюга? Якимось параметром чи вони у вас абсолютно гнучкі?

Відповідь: Так, вони абсолютно гнучкі. Тобто ми проводимо усереднення по всіх можливих конфігураціях гнучкого тримера. Якщо, наприклад, якби були не абсолютно гнучкі, а був якийсь закон розподілу дозволених конфігурацій цього ланцюжка, то це потрібно враховувати при усередненні.

Д. ф.-м. наук, професор Козловський М.П.:

1) Я хотів сказати, що тут досліджено вплив геометричних характеристик частинок на властивості – фактично, системи відліку. Чи не так?

Відповідь: Саме так.

2) В цьому цьому розділі також не розглядається притягання. А наскільки включення притягання змінить усі ці результати?

Відповідь: Для цього можна використовувати модифіковану версію, наприклад – полімеризованого Перкуса–Євіка, для того щоб описувати систему вже з притяганням. Тобто ми покращуємо систему відліку, для того, щоб змогти краще описувати більш складні системи.

Член-кореспондент НАН України М. Ф. Головкин:

1) Я лише хотів задати питання відносно останнього розділу. Що таке тут адсорбція як величина? Бо переважно про адсорбцію, починаючи з Гіббса, говориться як про надлишкову густину, яка зумовлена поверхнею. Вона може бути як позитивна, так і негативна. Коли вона негативна – це називають десорбцією. З точки зору теорії, побудованої свого часу Гіббсом, є дуже просте співвідношення, яке фактично, пов'язує адсорбцію з поверхневим натягом. Тобто диференціал від поверхневого натягу дорівнює диференціалу хімічного потенціалу, а коефіцієнтом є якраз коефіцієнт адсорбції, який визначається за Гіббсом. Тобто, якщо проінтегрувати цей коефіцієнт адсорбції по хімічному потенціалу, ми знайдемо поверхневий натяг. Але я не впевнений, що та адсорбція, про яку ви говорите – це є той коефіцієнт адсорбції, про який я говорю.

Відповідь: Ми розглядаємо процес адсорбції, який вимірюється ступенем накопичення частинок на адгезивній поверхні.

2) Частинки завжди є біля поверхні. Їх може бути більше, ніж в об'ємі і може бути менше, ніж в об'ємі.

Відповідь: Так, і ми якраз досліджуємо процес накопичення частинок на адгезивній поверхні залежний від кількості частинок в об'ємі, тобто від хімічного потенціалу в об'ємі.

Академік НАН України І. М. Мриглюд:

1) У мене два коротенькі питання. Перше: я хотів би уточнити – ким запропонована модель до останнього розділу. Чи це ваша модель, чи вона розглядалася кимось іншим? Це перше питання.

Відповідь: Ми використали модель, яка вже розглядалася в літературі для нерівноважної адсорбції. Це була тривимірна модель. А ми адаптували її для розгляду у випадку рівноважної адсорбції у вигляді двовимірної системи. Тобто у нас частинки ніби приходять з резервуара, але ми сам резервуар розглядаємо тільки за рахунок зміни хімічного потенціалу.

2) І друге питання. Мені здається, що якщо поверхня структурована дисками, і вони за розміром є дещо більшими, скажімо, вдвічі більші, ніж розмір частинки, то мав би спостерігатися ефект плато. Чи я помиляюся? Можливо, при більших хімічних потенціалах? Якщо, скажімо, розмір цього диска втричі перевищує розмір частинок, то три частинки можуть сісти на структурований один диск. І, відповідно, при більших хімічних потенціалах, ми мали б знову спостерігати щось на кшталт ефекту плато.

Відповідь: При тих параметрах, що нами розглядалися, ефект плато спостерігався лише, коли розміри частинок і адгезивних ділянок однакові.

3) Ви не дивилися на більші значення (хімічного потенціалу)?

Відповідь: Так, дивилися. Хімічний потенціал брався в інтервалі такому, що частинки досягали доволі високої упаковки.

4) Бо це, власне, був би теж ефект структурованої поверхні, але зв'язаний безпосередньо з геометрією частинок, які сідають на притягальні диски. І, відповідно, могло б на них поміщатися або одна частинка, або максимум – дві, або три. Якщо резервуар такий, що частинок багато, і ми починаємо збільшувати притягальні диски, то могло б на один диск сісти дві-три частинки.

Відповідь: Це залежить від розмірів частинок і від того, як вони будуть конкурувати за поверхню. Вплив структури поверхні найбільш відчутний якраз при середніх хімічних потенціалах.

Д. ф.-м. наук, професор Козловський М.П.:

1) В четвертому розділі ви нарешті говорите про притягання. Назаре, будь ласка, детальніше скажіть, що з чим притягається – лише частинки з поверхнею,

чи все-таки частинки з частинками теж притягаються?

Відповідь: Частинки між собою взаємодіють як тверді диски. Частинки притягуються лише до адгезивних ділянок поверхні.

Академік НАН України Головач Ю.В.:

1) Питання стосується тієї частини у другому розділі, де ви говорили про матрицю і про властивості плину усередині матриці. Коли я чую це термін “матриця”, я розумію, що цей безлад – невпорядковані домішки, і вони є нерухомими. Вони розподілені і зафіксовані. І у вашій роботі, і колеги з вашого відділу, ви це називаєте пористим середовищем. Коли я уявляю собі пори, то я уявляю собі щось на зразок губки. І дійсно, такі експерименти є, зокрема для плинів в пористому середовищі типу кремнієвих аерогелів, де є пори, в яких знаходиться плин. З вашої відповіді я зрозумів, що кількість цих частинок-домішок далека від того, щоб створити протяжні структури. Це є окремі частинки, які мають радіус, як ви сказали, вдвічі більший ніж частинки плину, і вони зафіксовані в просторі. Я ніколи не мав нічого проти моделей і я розумію цю модель. Мені цікаво про це слухати і я підтримую те, що ви робите. Але де таку модель можна застосувати? Розумієте, коли це є пори, вони утримуються в просторі тому, що вони є протяжні, і ви поміщаєте в них плин. Коли це є частинки, які не торкаються один одного, то цей безлад є рівноважний, і частинки плину в ньому плавають. А ті частинки, що є перешкодами (матрицею), саме ці частинки спричиняють те явище, яке ви досліджуєте. Отже, я маю уявити частинки, які, з одного боку – формують пори, з другого боку, вони зафіксовані, а з третього боку – вони не з’єднані. Отже, крім того, що це цікава математична задача і відтворює певну фізику, як ви бачите застосування такої фізики будь-де?

Відповідь: Така модель застосовувалась, зокрема, в тих роботах, які я наводив, для дослідження, наприклад, іонних рідин у пористому середовищі, наприклад іонна рідина знаходиться в пористому електроді.

2) Ну, пористий електрод, він не є настільки розріджений, щоб там частинки були не з’єднані.

Відповідь: Так, насправді при збільшенні упаковки матриці можна, в принципі, досягати того, коли в нас частинки матриці будуть торкатися одна з другою. Ми досліджували невисокі упаковки матриці. Нас цікавили залежності від густини плину, який є в такому середовищі.

3. ВИСТУПИ ПРИСУТНІХ

З оцінкою дисертаційної роботи Кукаркіна Н.Б., аспіранта відділу теорії м'якої речовини, виступили:

Д. ф.-м. наук, директор інституту **Т. М. Брик**:

Робота гарна. Видно, що Назар зробив багато досліджень. Прості моделі легко досліджувати. Ми всі знаємо, що найкраще всього вчитися і робити на простих моделях. Але коли переходимо вже до складних систем, то розробити теорію, яка би показувала, як себе поведуть несферичні частинки з різним ступенем асиметрії — це набагато складніше. Ці перші кроки, які зараз робляться, є дуже добрі кроки. І я думаю, що Назар і Тарас будуть у тому напрямку продовжувати. Так що я абсолютно позитивно дивлюся на ці дослідження. Я підтримую цю роботу і думаю, що її можна рекомендувати до захисту. Вітаю Назара з гарною зробленою роботою.

Член-кореспондент НАН України **М. Ф. Головкин**:

Я Назара знаю давно. Я знаю його ще з того часу, як він захищав дипломну роботу в університеті. Я тоді якраз був головою Державної екзаменаційної комісії. Я пам'ятаю Назара як дуже здібного і доброго студента. Я радий, що Назар через певний час прийшов до нас в інститут, і він дуже багато навчився. Він навчився і методів комп'ютерного моделювання, і навчився тих нових об'єктів, які він досліджував разом з Тарасом Миколайовичем. І робота дуже гарна, мені подобається. Я єдине, що хотів сказати, що кожен з цих трьох оригінальних розділів має щось таке, що можна було б розширювати в подальшому. В першому оригінальному розділі, тобто в другому розділі, розглядаються частинки в пористому середовищі, і тут отримані нові цікаві результати. У другому оригінальному розділі, тобто третьому, вже розглядається система без пористого середовища, але також є цікаві результати з дослідження жорстких тримерів, де пояснюється, яка різниця між жорсткими і гнучкими ланцюгами. Ну, а останній, четвертий розділ — розглядається адсорбція на поверхні, яка має частково притягальні ділянки. Запропоновано свого роду адаптацію тривимірної системи, в якій біля поверхні розглядається область лише першого шару частинок. Тоді таку систему можна розглядати як уже двовимірну задачу. Я хочу звернути увагу, що у третьому розділі немає пористого середовища. Також корисно було б розглянути його вплив і в четвертому розділі. Можна було б щось додатково вивчити і порівняти з тим, що є в попередніх розділах. Але ці дослідження можуть бути зроблені після захисту. Тобто тут є добрий заділ для наступної роботи. Отже, я підтримую цю дисертаційну роботу. Назар проявив себе добрим, здібним дослідником, багато навчився, багато зробив. Тож я бажаю йому успіхів, я вітаю його і його наукового керівника Тараса Миколайовича.

Академік НАН України, д. ф.-м. наук, головний науковий співробітник **І. М. Мриглод:**

Я хотів би подякувати за гарну презентацію. Єдине, що мотивація все-таки мала б бути сформульована ясніше. Я вже вдруге слухаю виступ, в мене вже менше питань, але мотивація для представлення результатів мала б бути переконливішою. Я не впевнений, що її достатньо зводити до тверджень про систему відліку. Бо я думаю, що якщо ми навіть використовуємо систему відліку в рамках якоїсь теорії збурень, то те, що ми краще знаємо систему відліку ще не означає, що теорія збурень спрацює краще. Але загалом це дуже добрий напрям, який орієнтований на цікаву фізику. Бо розмір і структура — мають значення. Задачі цікаві, як на мене. Це є першим кроком для напрацювання певної бази для розвитку таких систем, які відносяться до об'єктів теорії м'якої речовини. Тут отримано низку результатів, які є добрим фундаментом для того, щоб розвивати цей напрям. І мене тішить, що Назар переконав нас, принаймні мене точно, що він готовий працювати в цій ділянці, що він вже має відповідний фаховий кваліфікаційний рівень. Зовсім природним є вихід на захист і отримання ступеня доктора філософії. В цих роботах завжди будуть виникати цікаві питання. Зокрема те, що треба врахувати динаміку. Тобто, якщо мова йде навіть про такі непроникні об'єкти, то для рівнянь Ейлера можна розвивати підхід, який дозволяє використовувати метод послідовної молекулярної динаміки. Тут є напрацювання наприклад у Ігоря Петровича Омеляна — ціла низка результатів, які показують, що, наприклад, повільна коливна динаміка чи повільна обертальна динаміка інколи є досить суттєвими і дають досить несподівані результати, навіть з точки зору рівноважних властивостей. Дякую Назару, вітаю Тараса і бажаю вам успіхів.

Д. ф.-м. наук, професор, головний науковий співробітник **М. П. Козловський:** Мені також робота сподобалася, гарна робота, дисертабельна, можна подавати на захист. Хоча все таки хотілося б, щоб було таки розглянуто притягальні взаємодії між частинками. якщо між частинками нема притягання, то не може бути фазового переходу. І притягання визначає, скажімо, критичну температуру. От якби поцікавитися, в якому температурному діапазоні отримані результати. Можна було б також говорити про область вище критичної температури чи нижче. А тут такого, на жаль, нема. Але, тим не менше, дуже гарні результати, і графіки гарні, і досконало вивчена геометрія частинок в системі. Я думаю, що ця робота має великі перспективи, а Назар і його науковий керівник мають прийняти щирі вітання. І я їм бажаю успіху.

Д. ф.-м. наук, провідний науковий співробітник **О. В. Пацаган:**

Я хотіла б знову повернутися до перших двох оригінальних розділів, які, я вважаю, є дуже важливі в першу чергу з точки зору саме системи відліку. Якщо описуються такі моделі — це дуже суттєво. Коли в тебе система, яку ти моделю-

еш просто твердими сферами — то тут вже є багато напрацювань. Для об'ємного випадку — маємо наближення Перкуса–Євіка, для більших густин — наближення Карнагана–Старлінга. А якщо в матриці — то маємо розширення теорії масштабної частинки. Але якщо ти хочеш дослідити вже складніші системи, де є ланцюги, як от згадувалися — моделі іонних рідин, які представляються димерами або тримерами, залежно від довжини алкільного ланцюжка, то тут виникає небезпека: коли ти розвиваєш теорію — дуже важливо перевірити, як та чи інша система відліку з точки зору теорії узгоджується з результатами комп'ютерного експерименту. І тут, ця задача і її вирішення добре прослідковується. Ми, до речі, з цим зіткнулися в нашій групі, коли почали досліджувати моделі власне такої складної будови для іонної рідини в матриці. А тут — з одного боку, є симуляції, а з другого боку — Назар запропонував формулу. Бо теоретик любить, щоб все було аналітично. Ми користувалися полімерним наближенням Перкуса–Євіка. А Назару вдалося покращити цю формулу. Він показав, що якщо включити поправку, то для функції розподілу досягається краще узгодження з комп'ютерним моделюванням. Це є важлива частина роботи, де присутнє порівняння. Тому я вважаю, що цінність цієї роботи дуже велика з точки зору опису системи відліку. Ну, це моя думка як теоретика, який працює в рамках теорії збурень. Дякую. Дякую Назару за гарне представлення. І вважаю, що робота готова, є дисертабельною і готова до захисту.

Д. ф.-м. наук, провідний науковий співробітник **А. Д. Трохимчук:**

Я хотів би звернути увагу на роботу Назара трошки з іншої сторони. Доктор філософії — це є третій рівень вищої освіти. І, власне, завданням ось цього третього рівня вищої освіти в науково-освітній програмі є навчитися проводити дослідження. І от з цієї точки зору Назар продемонстрував, що він знає, як проводити дослідження. Власне в контексті отримання навичок проведення досліджень я хотів би також звернути увагу на наступне. Багато говорилося про контактні значення твердих частинок. І це вірно, бо там ми можемо говорити про контактні значення. Назар навів багато інформації про радіальні функції розподілу. А знаючи радіальні функції розподілу, можна рахувати термодинаміку, зокрема, рівняння стану. Ну, і коротко, буквально два зауваження, на які я б звернув увагу. От у висновках є таке речення: максимум радіальної функції розподілу щось показує. В радіальній функції розподілу є багато максимумів. Тому варто сказати, про який максимум іде мова. І також, коли говорилося про полімерне наближення Перкуса–Євіка, то прозвучало, що він точно описує результати комп'ютерних експериментів. Можливо, я пропустив, але там був якийсь критерій — чому можна говорити “точно”. Мені здається, що добре було б сказати “досить добре описує”. А так, от дійсно, я вважаю і підтримую — Назар виконав свою науково-освітню програму, він є готовим до проведення наукових досліджень.

Д. ф.-м. наук, заступник директора з наукової роботи, завідувач відділу
Т. М. Пацаган:

А всім дякую за участь у цьому семінарі, за те, що заслухали Назара. Він гарно попрацював, і я радий за нього. І радий, що його роботу шановне товариство високо оцінює. Хочу відштовхнутись від попередніх висловлювань Андрія Дмитровича: здобувач Назар Кукаркін отримав відповідні навички і знання. Бо здобуття ступеня доктора філософії це не лише дисертація, а ще й наша освітньо-наукова програма, яка включає цикл дисциплін. І всі наші аспіранти добре знають, що це не такий легкий процес. В перший рік аспірантури не дуже активно вдається займатися наукою через масу дисциплін. Тим не менше, Назар розпочав свою роботу в цей час. А останній рік — четвертий рік, то вже треба все закругляти. За теперішніми правилами — не так багато часу залишається на дисертацію. А хочеться зробити ще щось більше. Тим не менше, робота є закінченою. Звісно, представлене дослідження, з одного боку, дає відповіді на ряд запитань, і відзначу — доволі чіткі відповіді, а з іншого боку — відкриває простір для низки нових питань. Якщо пройти по розділах, то другий (оригінальний) розділ — це аналіз впливу структурних властивостей складних частинок. Так, вони є непроникні, такі от твердохастинкові комплекси у вигляді ланцюгів, чи спаяних ланцюгів або сфероциліндрів — це анізотропні частинки. І важливо було проаналізувати їхні структурні властивості. Чому? От багато говорилося про систему відліку. У розвитку теорії збурень ми завжди опираємося, і хочемо в це вірити, що принаймні система відліку врахована в нас якнайточніше. На базі неї ми вже розвиваємо збурену частину, чи то використовуємо асоціативні підходи, чи теорію Баркера–Гендерсона, чи інші теорії збурень. І ми апріорі собі констатуємо, що система відліку — це щось однозначне, і хоч може не стовідсотково точно, але таке, за що ми можемо бути спокійними. Для твердих сфер ми можемо бути спокійними, в тому числі для сумішей твердих сфер. Але стаємо зовсім неспокійними, коли переходимо на складніші моделі, коли частинки є анізотропні, несферичні. Прагнучи якнайшвидше врахувати притягання, про яке сьогодні згадував Михайло Павлович, чи різного роду інші складні взаємодії, ми менше звертаємо увагу на систему відліку. Ми хочемо вірити, що вона є добра. Ми з Назаром вирішили систематично проаналізувати випадок складних частинок — які для них будуть структурні властивості. Це зроблено для того, щоб той дослідник, який буде розвивати теорію збурень для складних частинок, звернув увагу на те, чим не можна нехтувати. Наприклад, сфероциліндр і жорстких ланцюг не є подібними, чи навіть ланцюг спаяних сфер не робить достатньої подібності із сфероциліндром. Навіть коли ми дуже близько спаяємо сфери, контактне значення все одно не буде таким, як у сфероциліндрі.

Наступний розділ — тут є трохи теорії. Виведена формула. Але перед тим проаналізовано просту, чудову аналітичну формулу полімеризованого Перкуса–Євіка. Так, ми можемо розв'язувати інтегральні рівняння, чисельно проводити розрахунки. Але, коли ми описуємо систему ланцюгових частинок, нам краще

мати гарну аналітичну формулу, якою є формула для контактного значення, отриману в полімеризованому наближенні Перкуса–Євіка. У нас виникла пропозиція: давайте покращимо цю формулу так, щоб точніше враховувати гнучкість ланцюгів чи модельних антитіл імуноглобулінів, що особливо важливо у безмежному розведенні. При більших густинах нами показано, що недолік недостатньо точного врахування гнучкості розмивається. Але у безмежному розведенні, при малих густинах, він проявляється і може потім давати сильне відхилення при застосуванні термодинамічної теорії збурень Вертгайма для асоціативних частинок. Це гарний розділ, це те, чим ми можемо насправді пишатися. Він включає аналіз, знаходження проблеми і її вирішення.

Ну і останній розділ, він трохи відходить від напрямку двох попередніх — розглядається система твердих дископодібних частинок на поверхні. Так, двовимірність — це є спрощення моделі, щоб виділити важливі риси. Ми часто конструємо спрощені моделі не через те, що їх важко описати теорією чи через складнощі комп'ютерного моделювання, а для того, щоб виділити важливі фізичні риси системи. От, як казав Ігор Миронович — розмір має значення. І ми показали це, і показали, яке значення він має. Мирослав Федорович запитував про коефіцієнт адсорбції. Так, є різні означення коефіцієнта адсорбції. І те, що отримав Назар, можна пов'язати також і з тим, про що згадував Мирослав Федорович. Але що є адсорбція? Адсорбція — це явище, процес. А коефіцієнт адсорбції — це те, що вимірює ступінь цього явища. І ступінь покриття частинками поверхні — це і є коефіцієнт адсорбції в Назара. Цей коефіцієнт був введений і він — об'єктивний. Двовимірна модель вибрана через те, що ми хотіли сфокусуватися, власне, на контактній площі між частинками і адгезивними ділянками. Це дуже важливо. Ця робота інспірована спільним проєктом із Сергієм Міньком про селективну адсорбцію клітин. Я хотів звернути увагу, що моделі, про які питався Ігор Миронович, вони є, і давно активно досліджуються вже пару десятків років. І в нашій аудиторії часто доповідалися подібні роботи Миколою Івановичем Лебовкою, але для нерівноважної адсорбції в рамках RSA моделей (Random Sequential Adsorption). Там двовимірна модель частинок, які депозитуються на поверхню. У нас теж є депозитування частинок на поверхню, до якої вони прилипають. Але в Назара розглядається рівноважна система — у ній частинки можуть як прилипати, так і відлипати. Це дуже гарний результат. Чіткий результат показаний Назаром, де він демонструє, коли селективність адсорбції є сильнішою. Якщо два сорти частинок по-різному притягуються, зрозуміло, що одного сорту прилипає до поверхні більше, а другого — менше. Але Назар показав, де ця різниця найбільша, де селективність проявляється найсильніше, а саме — коли розміри адгезивних доменів і частинок є однаковими. Крім того, є області, де можна контролювати цю селективну адсорбцію подальшим збільшенням або зменшенням адгезивних доменів, залежно від того, в якій області хімічних потенціалів ми працюємо. Це проаналізовано, показано і зроблено висновки. Ці висновки можна рекомендувати експериментаторам.

Назар попрацював гарно, статті опубліковано. На жаль, нема статей у вищих квартилях. Але є три статті в поважних журналах, нехай і квартилю Q4. Ще є препринт, і три виступи на конференціях. Формальні вимоги виконані: і освітня частина, і публікації, і дисертація. Якість дисертаційної роботи, на мою думку, є достойна успішного захисту та отримання Назаром ступеня доктора філософії. Я дякую шановному товариству за підтримку і хочу побажати Назару подальшого успіху в процедурі захисту дисертації.

Д. ф.-м. наук, професор, академік НАН України, головний науковий співробітник
Ю. В. Головач:

Ясно, що це навчальний ступінь, і Назар показав, що він вчиться. Разом з тим я вважаю, що тут є наукові результати — вони без сумніву є, і свідчення цього те, що опубліковано їх у трьох журналах. Звісно, що за сьогоднішньою подією стоїть клопітка праця наукового керівника, який веде свого учня. І так має бути. Тарасе, ви Назара гарно ведете. Раніше ви й Галю гарно вели. Бажаю вам особисто цю рису зберегти. Вітаю всіх учасників події. Також вважаю, що робота дисертабельна. Бажаю успіху на захисті, і в майбутньому.

4. ЗАСЛУХАВШИ ТА ОБГОВОРІВШИ ДОПОВІДЬ Кукаркіна Назара Борисовича, а також за результатами попередньої експертизи представленої дисертації на фаховому семінарі Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України, прийнято наступні висновки щодо дисертаційної роботи “Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів”.

ВИСНОВОК

фахового семінару зі спеціальності Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації “Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів” здобувача вищої освіти ступеня доктора філософії Кукаркіна Назара Борисовича за спеціальністю 104 – “Фізика та астрономія”

4.1. Актуальність теми дисертації

Актуальність дисертаційної роботи зумовлена необхідністю встановлення закономірностей структурних властивостей плинів твердих частинок складної форми та дослідження рівноважної адсорбції твердих частинок на просторово неоднорідних адгезивних поверхнях, що є важливим для розвитку теорії складних рідин і керування селективним розділенням частинок.

Контактні значення функцій розподілу є ключовими величинами асоціативних теорій рідин. Від точності їх визначення залежать розрахунки ступеня зв'язаності частинок, асоціативного внеску у вільну енергію та фазової поведінки системи. Для сферичних частинок ці характеристики добре досліджені, тоді як для ланцюгових і несферичних моделей наявні теоретичні підходи залишаються обмеженими. Потребує перевірки, зокрема, точність полімерного наближення Перкуса–Євіка для коротких ланцюгів, утворених сегментами різного розміру, а також для частинок із різним ступенем гнучкості. Форма частинки та внутрішньомолекулярне блокування істотно впливають на доступність контактів між сегментами. Важливим є також дослідження таких частинок у неупорядкованому пористому середовищі, де нерухома матриця створює додаткові стеричні обмеження.

Проведене методом Монте–Карло дослідження локальної структури мономерів поблизу димерів, гнучких і жорстких тримерів, спаяних ланцюгів та сфероциліндрів дає змогу встановити вплив форми та гнучкості на контактні значення функцій розподілу в об'ємі та у матриці неупорядкованого пористого середовища. Запропоноване вдосконалення аналітичного виразу для гнучких тримерів у границі нескінченного розведення спрямоване на підвищення точності теоретичного опису систем ланцюгових частинок.

Актуальність дослідження адсорбції на структурованих поверхнях пов'язана з можливістю керувати кількістю та складом адсорбованого шару шляхом зміни геометричних параметрів поверхні. Розміри та поверхнева густина адгезивних доменів можуть змінювати адсорбційну ємність навіть за однакової загальної площі адгезивного покриття. Для бінарних сумішей геометрія доменів може також впливати на селективність адсорбції. Встановлення зв'язку між геометрією поверхні, локальним заповненням доменів, адсорбцій-

ними ізотермами та складом адсорбованого шару є важливим для розуміння механізмів рівноважного розділення частинок. Отримані результати можуть слугувати основою для подальшого моделювання поверхонь, призначених для селективного захоплення, сортування та розділення молекулярних, колоїдних або мікрочастинкових сумішей.

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

Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України. Представлені в дисертації результати отримані згідно планів робіт в рамках бюджетних тем НАН України “Статистична теорія складних рідин: вплив просторового обмеження та анізотропії, мезоскопічне впорядкування та аномальні ефекти” (номер держреєстрації 0120U100202, 2022-2024 рр.) та “Асоціативні ефекти, адсорбційні явища та вплив зовнішнього поля у фізиці складних рідин” (номер держреєстрації 0125U000216, 2025-2026 рр.), а також гранту Міністерства освіти і науки України за рахунок зовнішнього інструменту допомоги Європейського Союзу для виконання зобов'язань України у Рамковій програмі Європейського Союзу з наукових досліджень та інновацій “Горизонт 2020” “Фазова поведінка іонних рідин у невпорядкованому просторовому обмеженні” (номер держреєстрації 0123U102729, 2023-2024 рр.)

4.3. Особистий внесок здобувача в отримання наукових результатів

Постановка наукової задачі, формулювання загальної мети, напрямів та методів дослідження здійснені науковим керівником — доктором фізико-математичних наук Пацаганом Т.М. До особистого внеску автора дисертації належить:

- проведення комп'ютерного моделювання методом Монте-Карло в канонічному ансамблі бінарних еквімолярних сумішей несферичних частинок з мономерами в об'ємній фазі та у невпорядкованому пористому середовищі; розрахунок радіальних функцій розподілу та контактних значень; аналіз та візуалізація результатів;
- аналіз причин відхилення контактних значень радіальних функцій розподілу мономер–сегмент для гнучких тримерів від відповідних значень для жорстких тримерів; розробка аналітичного підходу для врахування впливу всіх сегментів гнучкого тримера на контактні значення радіальних функцій розподілу сегмент–мономер і застосування його до систем тримера з різними розмірами сегментів;
- проведення моделювання адсорбції дископодібних частинок на структурованій адгезивній поверхні методом Монте-Карло у великому канонічному ансамблі та одержання залежності ступеня покриття поверхні частинками від хімічного потенціалу для одно- та двокомпонентних систем; розрахунок коефіцієнта селективності для двокомпонентної системи; аналіз впливу роз-

мірів та впорядкування адгезивних доменів на адсорбцію та селективність частинок.

Інтерпретація одержаних результатів, а також їхнє обговорення здійснювались спільно з науковим керівником.

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

Результати, отримані методом комп'ютерного моделювання Монте-Карло, порівнювали з наявними теоретичними підходами. Результати та висновки роботи були обговорені на семінарах та конференціях, опубліковані в наукових журналах.

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

За результатами дисертаційної роботи вперше:

- систематично досліджено вплив форми та розмірів твердих несферичних частинок (димерів, жорстких і гнучких тримерів, спаяних ланцюгів, сфероциліндрів) на структурні властивості еквімолярних бінарних сумішей з твердими сферичними мономерами в об'ємній фазі та у неупорядкованому пористому середовищі;
- показано, що полімерне наближення Перкуса–Євіка досить добре передбачає контактні значення радіальних функцій розподілу між сегментами жорстких тримерів та мономерами, коли суттєвим є вплив лише найближчих сегментів, проте передбачення цього наближення систематично відхиляються від результатів моделювання, якщо несуміжні сегменти істотно впливають на контактні значення;
- встановлено закономірності впливу розмірів та впорядкування адгезивних доменів на рівноважну та селективну адсорбцію твердих дископодібних частинок на структурованій адгезивній поверхні;

4.6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

За матеріалами дисертації опубліковано 7 наукових праць, з них: 3 статті у фахових наукових виданнях, що індексуються наукометричною базою Scopus [1–3], препринт [4] та 3 тези конференцій [5–7].

Статті:

1) Kukarkin N., Patsahan T. Contact values between segments of trimers and monomers in an equimolar binary mixture. // *Mathematical Modeling and*

Computing. – 2026. – Vol. 13, No. 2. – P. 448–462.

2) Kukarkin N., Patsahan T. Equilibrium adsorption of hard disks on patterned adhesive surfaces: a Monte Carlo simulation study. // *Journal of Physical Studies.* – 2026. – Vol. 30, No. 2. – P. 2604:1–12.

3) Kukarkin N., Patsahan T. Monte Carlo simulation of selective adsorption in a two-component hard-disk mixture on patterned adhesive surfaces. // *Condensed Matter Physics.* – 2026. – Vol. 29, No. 2. – P. 23802:1–10.

Препринт:

4) Кукаркін Н., Пацаган Т. Радіальні функції розподілу для нецентральної взаємодії у сумішах сферичних мономерів із короткими ланцюговими та сфероциліндричними частинками. – Львів, 2026. – 17 с. – (Препр. / НАН України, Ін-т фізики конденс. систем ім. І.Р. Юхновського; ICMP-26-02U).

Тези конференцій:

5) Patsahan T., Kukarkin N., “Adsorption and desorption of cells on micropatterned adhesive surfaces: A Monte Carlo simulation study”, A StatPhys29 satellite conference “Statistical Physics in Lviv”, June 30 – July 3, 2025, Lviv, Ukraine, Program and Abstracts, A27, p. 47.

6) Kukarkin N., Patsahan T., “Adsorption of disk-like particles on a patterned adhesive surface”, Statistical Physics: Theory and Computer Simulation, August 27–29, 2025, Lviv, Ukraine, Programme and Abstracts, PS 21, p. 107.

7) Кукаркін Н., Пацаган Т., “Контактні значення між сегментами тримерів та мономерами в еквімолярній бінарній суміші”, 25-та Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 30–31 жовтня 2025 р., Львів, Збірка тез, Д6, с. 21.

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

Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на наступних наукових конференціях: 25-та Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2025 р.), супутня конференція StatPhys29 «Statistical Physics in Lviv» (Львів, 2025 р.) та міжнародна конференція «Statistical Physics: Theory and Computer Simulation» (Львів, 2025 р.). Окрім того, результати доповідалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України та на засіданнях вченої ради Інституту в межах щорічних і семестрових звітів аспіранта (Львів, 2023–2026 рр.).

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

Було систематично досліджено вплив форми та розмірів твердих несферичних частинок — димерів, жорстких і гнучких тримерів, спаяних ланцюгів та сфероциліндрів — на структурні властивості їхніх еквімолярних сумішей з твердими сферичними мономерами в об'ємній фазі та у невідпорядкованому пористому середовищі. Ці результати є важливими для коректного вибору системи відліку при побудові теорій збурень для плинів анізотропних частинок. Проаналізовано межі застосовності полімерного наближення Перкуса–Євіка для контактних значень радіальних функцій розподілу між сегментами коротких ланцюгів та мономерами і запропоновано його модифікацію, яка явно враховує стеричне блокування поверхні сегмента усіма сегментами ланцюга; це забезпечує краще узгодження з даними комп'ютерного моделювання, особливо для гнучких ланцюгів у границі безмежного розведення. Отримані аналітичні вирази можуть застосовуватись у термодинамічній теорії збурень Вертгайма для опису систем з асоціативними взаємодіями. Крім того, встановлено закономірності впливу розмірів та впорядкування адгезивних доменів на рівноважну та селективну адсорбцію твердих дископодібних частинок на структурованих адгезивних поверхнях; показано, що вплив структурованості поверхні є найвиразнішим тоді, коли розмір адгезивної ділянки є співмірним із розміром частинки.

Отримані результати належать до галузі статистичної фізики м'якої речовини і можуть бути використані у навчальних курсах зі статистичної фізики та теорії рідин зокрема у розділах, присвячених теоріям збурень та явищам адсорбції.

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

Систематичний аналіз структурних властивостей сумішей несферичних частинок з мономерами дає розуміння того, як форма частинок впливає на структурні властивості плинів. Запропоноване покращення полімерного наближення Перкуса–Євіка забезпечує точніший аналітичний опис контактних значень радіальних функцій розподілу між сегментами коротких ланцюгів та мономерами. Ці результати є цінними для дослідників, які застосовують термодинамічну теорію збурень Вертгайма, оскільки дозволяють точніше добирати та описувати систему відліку, що є важливим для опису асоціативних молекулярних плинів та колоїдних систем.

Результати дослідження рівноважної та селективної адсорбції твердих дископодібних частинок на структурованих адгезивних поверхнях мають прикладне значення у галузях біотехнології та матеріалознавства, зокрема для проектування функціональних покриттів, сенсорів і платформ для контрольованого прикріплення наночастинок, молекул та клітин, а також у процесах їх розділення та сортува-

ння. Показано, що селективність адсорбції є найвищою, коли розміри адгезивних доменів та частинок є співмірними, а керувати нею можна зміною розмірів адгезивних доменів залежно від робочої області хімічних потенціалів. Ці висновки дають прості геометричні критерії, які можуть бути корисними для планування експериментів із застосуванням структурованих поверхонь.

4.10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Загалом дисертація має логічну структуру. Дисертаційна робота складається із вступу, розділу із оглядом літератури, трьох оригінальних розділів, основних висновків дисертації, списку використаних джерел і двох додатків.

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

У ході обговорення дисертації до здобувача не було висуното 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 високу теоретичну підготовку і необхідні професійні знання. Робота відповідає спеціальності 104 – “Фізика та астрономія”.

5. З урахуванням вище зазначеного, на фаховому семінарі зі спеціальності 104 – “Фізика та астрономія” Інституту фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України ухвалили:

5.1. Дисертаційна робота Назара Борисовича Кукаркіна на тему “Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів” є завершеною науковою працею, у якій розв’язані актуальні наукові завдання:

1) а) досліджено структурні властивості плинів несферичних твердих частинок (жорстких і гнучких ланцюгів, сфероциліндрів) в об’ємній фазі та у невпорядкованому пористому середовищі; б) встановлено, що термодинамічна еквівалентність моделей несферичних частинок не забезпечує еквівалентності їхньої локальної структури, зокрема радіальних функцій розподілу та їхніх контактних значень; в) з’ясовано, що форма, сегментна будова та гнучкість несферичних частинок визначають характерні особливості радіальних функцій розподілу, а невпорядкована матриця пористого середовища підсилює локальні кореляції, не змінюючи геометричного походження виявлених структурних закономірностей;

2) вперше визначено межі застосовності полімерного наближення Перкуса-Євіка

для контактних значень між сегментами тримерів і сферичними мономерами та запропоновано теоретичний підхід, у якому контактне значення визначається через доступну для контакту площу поверхні сегмента з урахуванням стеричного блокування від усіх сегментів тримера, що покращує опис гнучких тримерів у границі нескінченного розведення; 3) а) досліджено закономірності рівноважної та селективної адсорбції твердих дископодібних частинок на поверхнях, структурованих круглими адгезивними доменами; б) показано, що адсорбційні властивості поверхні та просторова організація адсорбованого шару залежать не лише від загальної площі адгезивного покриття, а й від розмірів, поверхневої густини та розташування доменів.

5.2. Матеріали дисертації Н. Б. Кукаркіна повністю висвітлені у 7 наукових публікаціях, з них 3 статті включено до міжнародних наукометричних баз.

5.3. Дисертація Н. Б. Кукаркіна відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. "Про затвердження вимог до оформлення дисертації", Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженому Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44.

5.4. З урахуванням наукової зрілості та професійних якостей Н. Б. Кукаркіна, дисертаційна робота "Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів" рекомендується до подання до розгляду та захисту на спеціалізованій вченій раді.

За затвердження висновку проголосували:

за	- 38 (одностайно)
проти	- 0 (немає)
утрималися	- 0 (немає)

Керівник семінару
академік НАН України,
доктор фіз.-мат. наук



Ю. В. Головач

Секретар семінару
наук. співробітниця,
к. фіз.-мат. наук



О. А. Добуш