Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000252

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-01-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гончар Юліан-Іван-Михайло Назарович
2. Yulian Ivan Mykhailo N. Honchar

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-2660-4593

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: ОП 48232 Освітньо-наукова програма третього рівня вищої освіти Інституту фізики конденсованих систем НАН України (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 07-03-2024

Спеціальність за освітою: Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.156.005 ID 4742

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Повне найменування юридичної особи: Університет Ковентрі

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Priory Street, 1, Coventry, CV1 5FB, Велика Британія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: https://ror.org/01tgmhj36

Сектор науки:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Англійська

Коди тематичних рубрик: 29.17, 29.19.37, 29.19.03, 29.29.43

Тема дисертації:

1. Особливості скейлінгу при фазових переходах вище критичної вимірності та описі процесів денатурації ДНК

2. Scaling properties of phase transitions above the upper critical dimension and in the description of DNA denaturation processes

Реферат:

1. Дисертація присвячена вивченню принципів скейлінгу та універсальності в критичних явищах, які є фундаментальними концепціями в багатьох ділянках науки. В теорії критичних явищ гіпотеза скейлінґу стверджує, що термодинамічні потенціали є узагальненими однорідними функціями відповідних змінних поблизу критичної точки, а універсальність означає, що поведінка системи не залежить від деталей і мікроскопічної структури системи. Незважаючи на те, що ці ідеї виявилися ефективними для вирішення різноманітних завдань, їх застосування та розуміння залишається неповним. Ця дисертація досліджує явища скейлінґу вище верхньої критичної вимірності та заглиблюється в масштабування складних полімерних мереж. При дослідженні скейлінґу над верхньою критичною вимірністю основна увага приділяється скінченновимірному скейлінґу з вільними граничними умовами. Звичайні методи недостатньо точні, що перешкоджає всебічному розумінню скейлінґової поведінки в різних явищах. Крім того, це дослідження стосується масштабування кополімерних мереж, зокрема в рамках моделі Поланди-Шераги, що описує термічну денатурацію ДНК. Для опису розщеплення ланцюга ДНК використовуються нові показники для кополімерних мереж. Структура дисертації наступна: чотири основні розділи (огляд літератури, комп'ютерне моделювання п’ятивимірної моделі Ізінга, аналіз Фур’є мод намагнічення та аналіз нулів Лі Янга, а також комплексне дослідження скейлінгових показників полімерних мереж), заключний розділ з ключовими висновками. У другому розділі ми підтверджуємо запропонований скейлінг для п’ятивимірної моделі Ізінга з вільними граничними умовами при псевдокритичній температурі. Ми використали алгоритм Вольфа для моделювання $d=5$ моделі Ізінга з вільними граничними умовами, щоб отримати скейлінгову картину таких величин, як намагнічення, ізотермічна сприйнятливість, енергія та теплоємність при нульовому магнітному полі та критичній, а також псевдокритичній температурах вище за верхню критичну вимірність $d_c=4$. У магнітному секторі спостерігаються узгоджені результати, підтверджуючи G-скейлінг (тривіальна фіксована точка Гауса, де всі поля прийняті за нуль) при критичній температурі T_c та Q-скейлінг (спеціальний скейлінг, у якому кореляції перевищують розмір системи, і введено новий показник $\qq$, який виправляє співвідношення гіперскейлінгу) при псевдокритичній температурі T_L для намагніченості. У третьому розділі застосовано нові підходи, зокрема дослідження Фур’є мод намагнічення, а також аналіз нулів статистичної суми (нулів Л-Янга) в комплексній площині, що підвищують точність спостережуваного скейлінгу. Ми показуємо, що Фур'є моди намагнічення повторюють поведінку намагнічення, спостережувану в розділі 2, і підтверджуємо Q-скейлінг, але не покращуємо кардинально скейлінгову картину. Аналіз на основі скінченновимірного скейлінгу нулів статистичної суми в комплексній площині призводить до поведінки першого нуля Лі-Янга як функції розміру системи L: $h_1\sim L^{-3,16 \pm 0,48}$ при $T_c $, що вказує на G-масштабування ($h_1\sim L^{-3}\,$), а $h_1\sim L^{-3.75}\,$ на T_L, що вказує на Q-скейлінг. Крім того, при дослідженні ізотермічної сприйнятливості в термінах нулів Лі-Янга з вищою точністю ліпше спостерігається скейлінгова поведінка у псевдокритичній точці T_L. Зауважимо, що цей скейлінг є набагато ближчим до Q-скейлінг, ніж до G-скейлінгу. Це вказує на те, що скейлінгова поведінка при вільних граничних умовах проявляється у спосіб, який більше узгоджується з Q-скейлінгом, ніж із попередніми суперечливими висновками в літературі, що дає цінну інформацію про динаміку цієї властивості. У четвертому розділі ми розглянули показники скейлінгу складної кополімерної мережі, яка виникає при термічній денатурації ДНК в межах моделі Поланда-Шераги. Ми отримали нові скейлінгові співвідношення для показника замикання петлі c, який контролює порядок фазового переходу з упорядкованої до невпорядкованої фази з урахуванням можливої неоднорідності між денатурованою петлею та зв’язаними ланцюгами. Наш аналіз ґрунтується на польовій теорії кополімерних мереж. Завдяки

співвідношенням скейлінгу, ми зв'язуємо показники замикання петлі c зі скейлінговими показниками $\eta_{f_1f_2}$, які визначають ентропійні властивості кополімерних зірок, створених взаємно взаємодіючими наборами f_1 SAW і f_2 RW. Використовуючи потужну техніку пересумовування, ми досліджуємо асимптотичні розклади для цих показників і оцінюємо їх при вимірності простору $d = 3$. Ми показуємо, що ефекти неоднорідності істотно впливають на силу переходу першого роду (показник c зростає в порівнянні зі звичайним однорідним випадком, коли всі ланцюги є SAW). Ми підтримуємо результати цього спостереження точними результатами для $d=2$. Крім того, ми показуємо, що таке загострення різкості фазового переходу стає ще суттєвішим у так званому зайнятому середовищі з далекосяжними корельованими неоднорідностями.

2. The thesis is devoted to the study of scaling and universality in critical phenomena that constitute foundational concepts in various scientific domains. In the theory of critical phenomena scaling hypothesis states that thermodynamic potentials are generalized homogeneous functions of their respective variables in vicinity of critical point, while universality in criticality means that the system's behaviour does not depend on the details and microscopic structure of the system. Despite their proven efficacy in diverse applications, the application and understanding of these fundamental concepts remain incomplete. In particular, this dissertation explores scaling phenomena above the upper critical dimension and delves into the scaling of complex polymer networks. In investigating scaling above the upper critical dimension, a focus is placed on finite-size scaling for systems with free boundary conditions. Conventional methods fall short in accuracy, hindering a comprehensive understanding of phenomena in physics and beyond. Additionally, this research addresses the scaling of copolymer networks, in particular within the Polanda-Scheraga model describing the thermal denaturation of DNA. Novel exponents for copolymer networks are employed to describe DNA chain unzipping. The thesis structure encompasses four chapters: a literature review, numerical simulations of the five-dimensional Ising model, Fourier analysis of magnetization modes and Lee Yang zeros analysis, and a comprehensive examination of scaling parameters in polymer networks. In the second chapter, the study validates proposed scaling for the five-dimensional Ising model with free boundary conditions at the pseudocritical temperature. We used Wolff algorithm to simulate $d=5$ Ising model with free boundary conditions to get a scaling picture of the quantitities like magnetisation, isothermal susceptibility, energy, and heat capacity at zero magnetic field and critical as well as pseudocritical temperatures above the upper critical dimension $d_c=4$. The "magnetic" sector, in general showed consistent results proving G-scaling (Gaussian trivial fixed point, where all fields are set to zero) at the critical temperature T_c, and Q-scaling (special scaling, where correlations exceed system size, and a new exponent $\qq$ is introduced to fix the hyperscaling) at the pseudocritical temperature T_L for magnetisation In the third chapter, innovative approaches involving study of magnetisation Fourier modes as well as analysis of partition function zeros in complex plane enhance the accuracy of observed scaling. We show that the magnetisation Fourier modes repeat the behaviour of magnetisation observed in Chapter 2 and confirm Q-scaling, but do not improve the scaling picture drastically. Analysis based on the FSS of partition function zeros in complex plane results in the following behaviour of the first Lee-Yang zero as function of system size L: $h_1\sim L^{-3.16 \pm 0.48}$ at T_c, that hints towards G-scaling ($h_1\sim L^{-3}\,$), and $h_1\sim L^{-3.75}\,$ at T_L, which hints towards Q-scaling. Moreover, when examining the isothermal susceptibility in terms of Lee-Yang zeros, a scaling behavior was observed at the pseudocrtitcal point T_L with better accuracy. Notably, this scaling is found to be much closer to Q-scaling than to G-scaling. This indicates that the scaling behaviour at FBC exhibits in a manner that is more consistent with Q-scaling than with the conflicting conclusions in the literature, providing valuable insights into the dynamics of this property. In the fourth chapter we have considered the scaling exponents of a complex copolymer network that occurs in the thermal denaturation of DNA within the Poland Scheraga model. We have derived new scaling relations for the loop closure exponent c that controls the order of the phase transition from ordered to disordered phase with the account of pssible heterogeeity between the denaturated loop and bound chains. Our analysis is grounded on the field theory of co-polymer networks. By scaling relations we connect loop closure exponents c to scaling exponents $\eta_{f_1f_2}$ that govern entropic properties of co-polymer stars made by mutually interacting sets of f_1 SAWs and f_2 RWs. Using powerful resummation

technique, we resum asymptotic expansions for these exponents and evaluate them at space dimension $d = 3$. As one can see, the effects of heterogeneity significantly influence the strength of the first order transition (the exponent c increases in comparison to the usual homogeneous SAW case). We support this observation providing exact results at $d=2$. Moreover, we show that the effect of strengthening is further enhanced by the so-called crowded environment with the long-range correlated inhomogeneities.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu. Variety of scaling laws for DNA thermal denaturation. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2021. — Vol. 573. — P. 125917. Scopus (Q1), DOI: 10.1016/j.physa.2021.125917
- Holovatch Yu., von Ferber C., Honchar Yu. DNA thermal denaturation by polymer field theory approach: effects of the environment. // Condensed Matter Physics. — 2021. — Vol. 24. — P. 33603. Scopus (Q3), DOI: 10.5488/CMP.24.33603

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0118U003012; 0123U100238

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головач Юрій Васильович
2. Yurij Holovatch

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, академік, 01.04.00

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-1125-2532

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кенна Ральф --
2. Ralph Kenna

Кваліфікація: д.філософ, професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0001-9990-4277

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Університет Ковентрі

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Priory Street, 1, Coventry, CV1 5FB, Велика Британія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: https://ror.org/01tgmhj36

Сектор науки:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лебовка Микола Іванович
2. Nikolai Lebovka

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.14

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-8314-0601

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05402714

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Козицький Юрій Васильович

2. Yuri Kozitsky

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.01.01

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-4320-8835

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Університет Марії Склодовської-Кюрі

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Pl. M. Curie-Sklodowskiej 5, Lublin, 20-031 Lub, Польща

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: https://ror.org/015h0qg34

Сектор науки:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дудка Максим Леонідович

2. Maxym Dudka

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0001-6971-8895

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Вальд Саша --

2. Sascha Wald

Кваліфікація: д.філософ, 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-1013-2130

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Університет Ковентрі

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Priory Street, 1, Coventry, CV1 5FB, Велика Британія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: https://ror.org/01tgmhj36

Сектор науки:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Мриглод Ігор Миронович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Мриглод Ігор Миронович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Гончар Юліан-Іван-Михайло Назарович
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна