Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0520U100440

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-09-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пацаган Тарас Миколайович

2. Patsahan Taras M.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.24

Назва наукової спеціальності: Фізика колоїдних систем

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 02-09-2020

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.156.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.21.07, 27.35.47 , 29.17.01 , 31.15.37

Тема дисертації:

1. Просторово обмежені плини: розвиток теоретичних підходів та комп'ютерне моделювання

2. Confined fluids: development of theoretical approaches and computer simulation

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розвитку теоретичних підходів і їх застосуванню до опису термодинамічних та структурних властивостей просторово обмежених плинів. Отримані результати доповнені даними комп'ютерного моделювання, що також проводилося в рамках цієї дослідницької роботи. Розглянуто декілька базових моделей просторових обмежень та їх модифікації. Зокрема, значну увагу приділено плинам в невпорядкованих пористих середовищах, що моделюються матрицею випадково розташованих твердих частинок з перетинанням і без перетинання. Для опису термодинамічних властивостей твердокулькового плину в таких пористих матрицях, отримано відповідні аналітичні вирази на основі теорії масштабної частинки (ТМЧ). Запропонований підхід узагальнено на випадок більш складних моделей невпорядкованої матриці таких, як губкоподібна матриця та матриця, сформована частинками несферичної форми. Показано, що результати розробленої теорії є у дуже доброму кількісному узгодженні із даними комп'ютерного моделювання. Теорія ТМЧ для твердокулькового плину в твердокульковій матриці була використана в якості системи відліку в рамках теорії збурень з метою вивчення фазових переходів газ-

рідина в простих плінах та асоціативних плінах, що описують плямисті колоїди із чотирма взаємодіючими центрами. Досліджено вплив невпорядкованої матриці на фазову поведінку цих плинів. Спостережено, що зменшення пористості матриці спричинює пониження критичної температури та критичної густини та, водночас, зауважено звуження області співіснування на фазовій діаграмі. Крім того, встановлено, що збільшення розміру частинок матриці при умові фіксованої пористості, призводить до збільшення критичної температури. Подальше застосування теорії ТМЧ стосується опису примітивної моделі іонного плину в невпорядкованій матриці нейтральних частинок. З цією метою, метод колективних змінних був поєднаний із теорією ТМЧ, в результаті чого отримано вирази для основних термодинамічних величин в наближенні, що враховує внески вищі ніж гаусове наближення. Завдяки цьому, вивчено фазові переходи газ-рідина просторово обмеженого іонного плину із розмірною та зарядовою асиметрією. Розраховані фазові діаграми показали, що критичні параметри іонного плину сильно залежать від пористості матриці та розмірів матричних частинок, що, в цілому, повторює ефект, спостережений у випадку простого плину. Разом з тим, зауважено, що цей ефект може бути суттєво підсилений розмірною асиметрією іонів. З іншого боку, зарядова асиметрія помітно послаблює вплив присутності матриці. Використовуючи теоретико-польовий підхід в наближенні середнього поля та гаусовому наближенні, досліджено структурні властивості трьох якісно різних моделей плину в просторовому обмеженні паралельних твердих стінок. А саме, розглянуто модель із подвійним парним потенціалом Юкави, осцилюючим потенціалом Юкави та модель нематичного плину Майєра-Заупе, для яких розраховано парні кореляційні функції в об'ємній фазі та профілі густини плину біля твердої стінки. Для нематичного плину розраховано також орієнтаційні характеристики такі, як параметр порядку, в тому числі профіль параметру порядку в залежності від відстані до стінки. Спостережено, що контактне значення профілю густини може мати немонотонну залежність від температури. А у випадку нематичного плину, зауважено суттєве порушення орієнтаційного порядку поблизу стінки. Для оцінки точності отриманих теоретичних результатів проведено відповідні розрахунки методом комп'ютерного моделювання Монте-Карло. Показано, що гаусове наближення забезпечує набагато кращий кількісний опис профілю густини плину ніж наближення середнього поля. За допомогою методу дисипативної динаміки проведено комп'ютерне моделювання для опису процесів мікрофазного розшарування двокомпонентного плину між двома твердими стінками, які функціоналізовані полімерними щітками у вигляді періодичних смуг. При фіксованій довжині полімерів досліджено морфологію отриманих фаз в залежності від відстані між стінками та ширини смуг, а також при різних композиціях компонент плину, що представляли собою добрий і поганий розчинник. В результаті, встановлено умови, за яких можуть виникати фази різної морфології, що утворюються різними компонентами. Запропонований підхід узагальнено на випадок опису процесу набрякання пористої мембрани, для якої отримано залежності розмірів пор та товщини мембрани від композиції розчинників. Отримані результати якісно узгоджуються з результатами експерименту.

2. The thesis is devoted to the development of theoretical approaches and their application to the description of thermodynamic and structural properties of a confined fluid. The obtained theoretical findings are supplemented by the results of computer simulations performed within this study. Several basic models of confinement and their modifications are considered. In particular, main attention is paid to disordered porous media modeled by a matrix of randomly distributed hard particles with and without overlapping. Analytical expressions are proposed to describe the thermodynamic properties of the hard-sphere fluid in these models of porous media, which were obtained on the basis of scale particle theory (SPT). This theory was also extended by taking into account more sophisticated models such as a sponge-like matrix and a matrix formed by particles of a non-spherical shape. It is shown that the results of the developed theory are in a good quantitative agreement with the computer simulation data. The SPT theory of a hard-sphere fluid confined in a hard-sphere matrix is used for the description of the reference system within the perturbation theory to study a liquid-vapour phase transition in a simple fluid and in an associative fluid of patchy colloids with four interacting sites. It was found that both the critical temperature and the critical density decrease with a decrease of the matrix porosity, and simultaneously the coexistence region of phase diagrams gets narrower. Furthermore, it is also shown that an increase of matrix particles size can lead to a growth of the critical temperature. A further application of the SPT theory concerns the description of the

primitive model of an ionic fluid in an uncharged disordered matrix. For this purpose, the method of collective variables was combined with the SPT and the corresponding equations for the main thermodynamic quantities were derived with taking into account the terms higher than the Gaussian approximation. Therefore, the liquid-vapour phase transition of the confined ionic fluid was investigated with the asymmetry of oppositely charged ions, both in charges and sizes. The obtained phase diagrams show that the critical parameters of ionic fluids strongly depend on the matrix porosity and the sizes of matrix particles, and in general have the same trends as in simple fluids. Furthermore, the size asymmetry of oppositely charged ions strengthens this effect. On the contrary, the charge asymmetry significantly suppresses the influence of the matrix presence. Using the field-theory approach in the mean-field and Gaussian approximations, the structural properties were studied for three qualitatively different fluid models in the confinement formed by two parallel hard walls. Specifically, the model of two-Yukawa pair potential, oscillating Yukawa potential and the model of nematic Maier-Saupe fluid are considered, for which pair correlation functions in the bulk and density profiles in the confinement with respect to the hard wall are obtained. For the nematic fluid, orientation characteristics such as the order parameter and its profile depending on the distance to the wall are also calculated. It is observed that the contact value of the fluid density profile can have a non-monotonous dependence on temperature. In the case of a nematic fluid, a significant disruption of orientational order in the vicinity of hard walls is noticed. To assess an accuracy of the obtained theoretical results, the corresponding computer simulations with the use of Monte-Carlo method were performed. It is shown that the Gaussian approximation provides a much better quantitative description of the fluid density profile than the mean-field approximation. Using the dissipative dynamics, computer simulations were performed to study the processes of microphase separation in a binary fluid between two hard walls, functionalized with nonostructured polymer brushes in the form of stripes. At a fixed polymer length, the morphology of the obtained phases was investigated depending on the distance between the walls and the width of the stripes, as well as depending on the different compositions of the fluid components, represented by good and bad solvents. The conditions are established under which the phases of different morphology (layered, columnar, mixed, droplets) can be formed. The proposed approach is generalized for the description of swelling processes in a porous membrane, for which the values of pore size and the membrane thickness are obtained depending on the solvent composition. The obtained results agree well with experimental findings at the qualitative level.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головко Мирослав Федорович

2. Holovko Myroslav Fedorovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головко Мирослав Федорович

2. Holovko Myroslav Fedorovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чалий Олександр Васильович

2. Chalyi Alexander V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бакай Олександр Степанович

2. Bakai Oleksandr S.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ковальчук Володимир Іванович

2. Kovalchuk Volodymyr I.

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

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	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.