# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0420U101953

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 16-11-2020

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шмотолоха Володимир Ігорович
2. Shmotolokha Volodymyr I.

**Кваліфікація:** 01.04.24

**Ідентифікатор ORCHID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат 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:** 05-11-2020

**Спеціальність за освітою:** Фізика

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

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 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 Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 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 Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 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:** 29.17.25 , 29.19.03 , 31.15.37

**Тема дисертації:**

1. Вплив пористих середовищ на термодинамічні властивості та фазову поведінку анізотропних плинів
2. Effects of porous media on thermodynamic properties and phase behavior of anisotropic fluids

**Реферат:**

1. Дисертація присвячена розвитку теоретичних підходів до опису термодинамічних властивостей анізотропних плинів та дослідженню їхньої фазової поведінки в об'ємі та у невпорядкованому пористому середовищі. Розглянуто декілька моделей анізотропних плинів (опуклі несферичні частинки, сфероциліндричні частинки) у невпорядкованому пористому середовищі. Зокрема, значну увагу приділено анізотропним сфероциліндричним плинам. Для опису термодинамічних властивостей таких систем отримано відповідні аналітичні вирази на основі теорії масштабної частинки (ТМЧ), яка була узагальнена на анізотропні плини. Показано, що результати узагальненої теорії є у доброму якісному і кількісному узгодженні із даними комп'ютерного моделювання. ТМЧ для анізотропних плинів в невпорядкованій матриці була використана в якості системи відліку в рамках теорії збурень з метою вивчення фазових переходів газ-рідина-нематик і газ-нематик1-нематик2. Було представлено вдосконалену версію

узагальненого рівняння Ван дер Ваальса для анізотропних плинів у невпорядкованих пористих матрицях. Досліджено вплив невпорядкованого пористого середовища на фазову поведінку цих плинів. Показано, що зменшення пористості пористого середовища спричинює пониження критичної температури та критичної густини, а також приводить до звуження області співіснування газ-рідина на фазовій діаграмі. Показано вплив пористості пористого середовища на ізотропно-нематичне та нематично-нематичне співіснування і виявлено, що пористе середовище може розширити ізотропно-нематичний фазовий перехід таким чином, що фазовий перехід газ-рідина зникає. Як перший крок, було узагальнено теорію масштабної частинки на випадок несферичних опуклих частинок у невпорядкованому пористому середовищі. Для такої моделі було досліджено вплив несферичності частинок плину і пористості пористого середовища на термодинамічні властивості такої системи. Було узагальнено вплив притягання на анізотропний несферичний плин. Було перевірено отримані результати з наявними результатами комп'ютерного моделювання для фазової поведінки твердосферного плину в матрицях різних розмірів. Було представлено розробку теорії для опису анізотропних молекулярних плинів з анізометрією частинок, молекули яких характеризуються короткодіючою відштовхувальною взаємодією. Було запропоновано узагальнення рівняння на анізотропні плини в пористих середовищах, яке базується на рівнянні стану твердих сфероциліндричних частинок у невпорядкованому пористому середовищі, отриманому в рамках теорії масштабної частинки. На основі отриманого рівняння ми проводимо дослідження ізотропно-нематичної фазової поведінки молекулярних систем в залежності від анізометрії молекул та пористості пористого середовища. Показано, що пористе середовище приводить до пониження густини ізотропно-нематичного фазового переходу. Спостережено, що точність SPT2b1 зменшується із зменшенням довжини сфероциліндричних частинок. Було запропоновано покращення теорії SPT2b1 і з цією метою розроблено два різні підходи. Перший з них - так званий підхід SPT2b1-КС-ПЛ, який включає два виправлення. Перше - корекція Карнахана-Старлінга (КС), яка покращує характеристику термодинамічних властивостей SPT при більш високій густині плину. Друге Парсонса-Лі (ПЛ) коректує опис орієнтаційного упорядкування в плині твердих сфероциліндрів при високій густині плину. Фазова діаграма плину твердих сфероциліндрів у невпорядкованому пористому середовищі розраховується двома різними способами. Один з них пов'язаний з біфуркаційним аналізом розв'язку нелінійного інтегрального рівняння для одночастинкової функції розподілу, отриманої з мінімізації вільної енергії. Другий спосіб базується на умові термодинамічної рівноваги. У дисертаційній роботі узагальнено та застосовано схему чисельного розрахунку, яка була запропонована Дж. Герцвільд з співавторами для обчислення унарної функції в об'ємі в системах з анізометрією частинок і анізотропією притягальної взаємодії дана схема була узагальнена на наявність невпорядкованого пористого середовища. Розраховані фазові діаграми показали, що критичні параметри нематогенного плину залежать від пористості матриці, що повторює ефект, який є у простих твердосферичних плинах. Наостанок, використовуючи ТМЧ для опису системи відліку, було узагальнено рівняння Ван дер Ваальса та досліджено фазову поведінку сфероциліндричних молекулярних плинів у невпорядкованому пористому середовищі. Досліджено вплив видовженості сфероциліндричних частинок на ізотропно-нематичне співіснування та показано, що збільшення видовженості частинок плину твердих сфероциліндрів приводить до появи нематично-нематичного фазового переходу. Проведено порівняння запропонованої моделі і отриманої в її рамках фазової діаграми з фазовими діаграмами, отриманими для розчинів поліпептидів полі (гамма-бензил-L-глутамату) (ПБЛГ) в диметилформаміді (ДМФА). Показано якісне узгодження отриманих результатів з експериментальними даними для розчинів поліпептидів в диметилформаміді (ДМФА).

2. The thesis is devoted to the development of theoretical approaches for the description of thermodynamic properties and phase behavior of anisotropic fluids in the bulk and in random porous media. Several models of anisotropic fluids (convex non-spherical particles, spherocylindrical particles) confined in a disordered porous medium are considered. Notably, special attention is given to anisotropic spherocylinder fluids. Analytical expressions for thermodynamic properties of such systems are obtained based on the scaled particle theory (SPT) generalized for anisotropic fluids. The results of the generalized theory are shown to be in good qualitative and quantitative agreement with computer simulations data. The SPT for anisotropic fluids in disordered media is used

to describe the reference system in the framework of a perturbation theory for the study of vapor-liquid-nematic and vapor-nematic1-nematic2 phase transitions. An improved version of the generalized van der Waals equation for anisotropic fluids in disordered porous media is presented. The effect of a disordered porous medium on the phase behavior of these fluids is investigated. Lower porosity of the porous medium leads to a lower critical temperature and critical density as well as the narrowing of the vapor-liquid phase coexistence region. Effects of the porosity of the porous medium on the isotropic-nematic and nematic-nematic coexistence are studied. We show that the vapor-liquid phase transition can vanish due to the porous medium widening the isotropic–nematic phase transition. As the first step, the scaled particle theory is generalized to the case of non-spherical convex particles in a disordered porous medium. We study the effect of non-sphericity of fluid particles and the porosity of the porous medium on thermodynamic properties of such a system. Subsequently the role of attraction in anisotropic non-spherical fluids is investigated. The results obtained are tested against computer simulations data for the phase behavior of hard fluids in media of various sizes. A theory for the description of anisotropic molecular fluids with particles characterized by short-range repulsion is developed. The equation of state is generalized for anisotropic fluids in porous media based on the equation of state of hard spherocylindrical particles in a random porous medium derived in the framework of the SPT. Based on the equation obtained we investigate the isotropic-nematic phase behavior of molecular systems as a function of particle anisotropy as well as the porosity of the porous medium. We show that the porous medium lowers the density of the isotropic-nematic phase transition. The accuracy of the SPT2b1 is observed to decrease as the elongation of spherocylindrical particles decreases. Improvements to the SPT2b1 theory are proposed and, as a result, two different approaches are developed. The first one is the so-called SPT2b1-CS-PL approach which includes two corrections. One is the Carnahan-Starling correction which improves the description of thermodynamic properties at higher fluid densities. The second is the Parsons-Lee correction which improves the description of orientational ordering in a fluid of hard spherocylinders at high densities of the fluid. The phase diagram of a hard spherocylinder fluid in a disordered porous medium is calculated via two different methods. One approach is connected with the bifurcation analysis of the solution of a non-linear integral equation for the singlet distribution function obtained from the minimization of the free energy. Another approach is based on the condition of thermodynamic equilibrium. The numerical method proposed by J. Herzfeld and co-authors for the calculation of the bulk singlet function in systems with particle anisotropy and anisotropy of attractive interaction is generalized to account for the presence of a random porous medium. The phase diagrams obtained reveal that the critical parameters of a nematogenic fluid depend on the porosity of the medium, reproducing a known corresponding effect for simple spherocylinder fluids. Finally, using the SPT for the description of the reference system, the van der Waals equation is generalized and the phase behavior of a spherocylinder molecular fluid in a random porous medium is studied. The effect of the elongation of spherocylindrical particles on the isotropic-nematic coexistence is investigated. As particle elongation increases, a nematic-nematic phase transition is shown to emerge. The model proposed and the respective phase diagram are compared to the phase diagrams obtained for polypeptide solutions in dimethylformamide. The results obtained are shown to be in qualitative agreement with the experimental data for the polypeptide solutions in dimethylformamide.

**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

**Кваліфікація:** 01.04.02

**Ідентифікатор ORCHID 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. Лисецький Лонгін Миколайович
2. Lisetski Longin M.

**Кваліфікація:** 01.04.14, 01.04.15

**Ідентифікатор ORCHID 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. Фечан Андрій Васильович

2. Fechan Andriy

**Кваліфікація:** 01.04.15, 05.12.20

**Ідентифікатор ORCHID 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. |