Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004924

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кукаркін Назар Борисович
2. Nazar B. Kukarkin

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0005-8787-5639

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: Доктор філософії зі спеціальності «Фізика та астрономія»

Дата захисту: 09-10-2026

Спеціальність за освітою: фізика

Місце роботи здобувача: Організація відсутня

Код за ЄДРПОУ: 00000000

Місцезнаходження: ------, Київ, 00000, Україна

Форма власності: Змішана

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 16975

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.17, 28.17.15, 29.19.03, 31.15.35

Тема дисертації:

1. Вплив форми і розмірів частинок на структурні та адсорбційні властивості модельних плинів

2. Effect of particle shape and size on the structural and adsorption properties of model fluids

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена вивченню впливу форми та розмірів твердих частинок на структурні та адсорбційні властивості в системах модельних плинів. Дослідження виконано методом комп'ютерного моделювання Монте-Карло в канонічному та великому канонічному ансамблях із залученням аналітичних і чисельних розрахунків. Розглянуто рівноважні системи твердих частинок складної форми в об'ємній фазі, у невпорядкованому пористому середовищі та на структурованих адгезивних поверхнях. У першій частині роботи досліджено еквімолярні бінарні суміші твердих сферичних мономерів із димерами, жорсткими та гнучкими тримерами, короткими ланцюгами спаяних сфер і сфероциліндрами. Основну увагу приділено радіальним функціям розподілу та їхнім контактним значенням між мономерами і окремими сегментами несферичних частинок. Порівняння отриманих результатів для випадків димерів і сфероциліндрів показало, що рівність виключених об'ємів цих двох типів частинок дає змогу досягнути еквівалентності

термодинамічного опису, проте не забезпечує однакової локальної структури. Відмінності радіальних функцій розподілу зумовлені формою поверхні частинок, сегментною будовою ланцюгів, їхньою гнучкістю та доступністю окремих сегментів для контакту з мономерами. У невпорядкованій твердосферній матриці ці структурні особливості зберігаються і проявляються виразніше внаслідок просторового обмеження. Окремо проаналізовано контактні значення радіальних функцій розподілу в сумішах твердих тримерів і мономерів та перевірено точність аналітичного виразу для контактного значення між цими компонентами у полімерному наближенні Перкуса-Євіка. Показано, що його застосовність залежить від жорсткості ланцюга та співвідношення розмірів сегментів і мономерів. Для врахування впливу всіх сегментів гнучкого тримера запропоновано підхід, який ґрунтується на визначенні доступної для контакту частини поверхні сегмента. Отримані аналітичні вирази покращують опис контактних значень у границі нескінченного розведення та дають фізичне пояснення відхилень від стандартного полімерного наближення Перкуса-Євіка. У другій частині роботи розглянуто рівноважну адсорбцію твердих дископодібних частинок на двовимірних структурованих поверхнях з круглими адгезивними ділянками, які утворюють масив впорядковано або невпорядковано розташованих доменів. Енергію притягальної взаємодії частинки з поверхнею задано пропорційною площі її контакту з доменами. Досліджено вплив розмірів доменів, ступеня покриття ними поверхні та їхнього просторового розподілу на ізотерми адсорбції і структуру адсорбованого шару. Результати показують, що адсорбційні властивості визначаються не лише загальною площею адгезивного покриття, а й співвідношенням розмірів частинок та доменів. Малі домени формують наближено однорідне поле притягання, домени, співмірні з розмірами частинок, сприяють локалізованій адсорбції, а більші домени можуть одночасно захоплювати декілька частинок. Цю модель узагальнено на бінарну суміш частинок, які відрізняються лише енергією притягання з доменами. Це дало змогу дослідити вплив геометрії поверхні безпосередньо на селективність адсорбції. Показано, що розмір і просторове розташування доменів найбільше впливають на склад адсорбованого шару за низьких і середніх значень хімічного потенціалу, коли компоненти конкурують за енергетично вигідні положення. При щільнішому заповненні роль структури поверхні зменшується через посилення обмежень пакування. Отримані результати уточнюють вплив форми та розмірів частинок на локальну структуру модельних плинів твердих несферичних частинок і контактні значення радіальних функцій розподілу між ними. Встановлені закономірності адсорбції твердих частинок на структурованих адгезивних поверхнях можуть бути використані для керування адсорбційною ємністю та селективністю таких поверхонь.

2. The dissertation is devoted to studying the effects of the shape and size of hard particles on the structural and adsorption properties of model fluid systems. The study was carried out using Monte Carlo computer simulations in the canonical and grand-canonical ensembles, supplemented by analytical and numerical calculations. Equilibrium systems of hard particles of complex shape were considered in the bulk phase, in a disordered porous medium, and on patterned adhesive surfaces. The first part of the dissertation examines equimolar binary mixtures of hard spherical monomers with dimers, rigid and flexible trimers, short chains of fused spheres, and spherocylinders. Particular attention is paid to the radial distribution functions and their contact values between the monomers and individual segments of the non-spherical particles. A comparison of the results obtained for dimers and spherocylinders showed that matching the excluded volumes of these two particle types makes it possible to achieve equivalence at the level of their thermodynamic description but does not result in identical local structures. The differences between the radial distribution functions arise from the particle surface geometry, the segmented structure of the chains, their flexibility, and the accessibility of individual segments for contact with the monomers. In a disordered hard sphere matrix, these structural features persist and become more pronounced due to spatial confinement. The contact values of the radial distribution functions in mixtures of hard trimers and monomers were analysed separately, and the accuracy of an analytical expression for the contact value between these components, derived within the polymer Percus-Yevick approximation, was assessed. Its applicability was shown to depend on the chain rigidity and the size ratio between the segments and monomers. To account for the influence of all segments of a flexible trimer, an approach based on determining the fraction of the segment surface accessible for contact was proposed. The resulting analytical expressions improve the

description of the contact values in the infinite dilution limit and provide a physical explanation for deviations from the standard polymer Percus-Yevick approximation. The second part of the dissertation considers the equilibrium adsorption of hard disk particles on two-dimensional patterned surfaces containing circular adhesive regions represented by arrays of domains arranged either regularly or randomly. The attractive particle-surface interaction energy was taken to be proportional to the area of overlap between a particle and the domains. The effects of the domain size, the surface coverage by the domains, and their spatial distribution on the adsorption isotherms and the structure of the adsorbed layer were investigated. The results show that the adsorption properties are determined not only by the total area of adhesive coverage but also by the size ratio between the particles and the domains. Small domains generate an approximately uniform attractive field, domains comparable in size to the particles promote localised adsorption, whereas larger domains can simultaneously accommodate several particles. The model was extended to a binary mixture of particles differing only in the strength of their attractive interaction with the domains. This made it possible to investigate the direct influence of surface geometry on adsorption selectivity. The domain size and spatial arrangement were shown to have the strongest effect on the composition of the adsorbed layer at low and intermediate chemical potentials, where the components compete for energetically favourable positions. At higher surface loadings, the role of the surface structure diminishes because of increasingly restrictive packing constraints. The results obtained clarify the effects of particle shape and size on the local structure of model fluids of hard non-spherical particles and on the contact values of the corresponding radial distribution functions. The identified adsorption trends for hard particles on patterned adhesive surfaces may be used to control the adsorption capacity and selectivity of such surfaces.

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:

- 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. DOI: https://doi.org/10.23939/mmc2026.02.448
- 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. DOI: https://doi.org/10.30970/jps.30.2604
- 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. DOI: https://doi.org/10.5488/cmp.29.23802
- Кукаркін Н., Пацаган Т. Радіальні функції розподілу для нецентральних взаємодій 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).
- Patsahan T., Kukarkin N. Adsorption and desorption of cells on micropatterned adhesive surfaces: A Monte Carlo simulation study StatPhys29 satellite conference "Statistical Physics in Lviv", June 30-July 3, 2025, Lviv, Ukraine. Program and Abstracts, A27, P. 47.
- 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.

- 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.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0120U100202 0125U000216 0123U102729

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пацаган Тарас Миколайович

2. Taras Patsahan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7870-2219

Додаткова інформація: https://www.webofscience.com/wos/author/record/V-8175-2017; https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7801655813; https://scholar.google.com.ua/citations?user=xX7KLoEAAAAJ&hl=uk&oi=ao

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мудрий Степан Іванович

2. Stepan I. Mudry

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1760-8840

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 8411877900; Web of Science Researcher ID: P-1607-2018; https://scholar.google.com.ua/citations?user=EjBgNfcAAAAJ&hl=uk

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ковальчук Володимир Іванович
2. Volodymyr I. Kovalchuk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4783-6342

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, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Верхоляк Тарас Михайлович
2. Taras M. Verkholyak

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-1627-6701

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Баумкетнер Андрій Богданович

2. Andriy B. Baumketner

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2726-931X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Дудка Максим Леонідович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Дудка Максим Леонідович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Кукаркін Назар Борисович
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

