Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U100169

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Воронкін Андрій Анатолійович

2. Voronkin Andrii

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 161

Назва наукової спеціальності: Хімічна та біоінженерія. Хімічні технології та інженерія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 28-01-2021

Спеціальність за освітою: Хімічні технології переробки полімерних та композиційних матеріалів

Місце роботи здобувача: Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут"

Код за ЄДРПОУ: 02071180

Місцезнаходження: вул. Кирпичова, буд. 2, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61002, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 64.050.013

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут"

Код за ЄДРПОУ: 02071180

Місцезнаходження: вул. Кирпичова, буд. 2, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61002, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут"

Код за ЄДРПОУ: 02071180

Місцезнаходження: вул. Кирпичова, буд. 2, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61002, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 61.61.29

Тема дисертації:

1. Полімерні нанокомпозити з нелінійно-оптичними властивостями

2. Polymer nanocomposites with nonlinear optical properties

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена створенню сітчастих епоксидних полімерних нанокомпозитів з нелінійно оптичними (НЛО) властивостями на основі дигліцидилового етеру бісфенолу А, наповненого хромофорами флавонольного типу. Досліджено закономірності впливу оптичних, термічних, морфологічних властивостей на нелінійно-оптичні параметри наповнених епоксидних полімерних нанокомпозитів і встановлено оптимальну концентрацію наповнювача, за якої не відбувається зниження НЛО активності таких матеріалів. У дисертаційній роботі вперше були отриманні полімерні матеріали з високою нелінійно-оптичною активністю на основі епоксидного полімеру, наповненого природними флавонолами (кверцетин, фізетин), а також хімічно модифікованим природним флавонолом (сульфокверцетином). За допомогою УФ- і видимої спектроскопії виявлено, що молекули наповнювачів, за умов одержання полімерного композиту молекули існують принаймні у двох формах: нейтральній та аніонній. Кількісний перерозподіл між цими двома

формами з підвищенням концентрації хромофору в полімерній матриці призводить до утворення асоціатів з різною полярністю, що обумовлює різну спектральну поведінку полімерних нанокомпозитів. Встановлено, що при вмісті хромофору більше чим 20 мас. %, утворені його молекулами асоціати перешкоджають орієнтації молекул наповнювача в електричному полі коронного розряду. Виконані квантово-хімічні розрахунки молекулярної гіперполяризовності (□) різних хромофорів флаванольного показали, що найбільше значення цього параметру має 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавон(кверцетин, □=3.03 ×10-40). Тому, з метою підвищення НЛО активності наповнювача у роботі був розроблений режим хімічного модифікування саме 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавон за рахунок введення до його хімічної структури сульфогрупи, яка за своєю природою є акцептором Гідрогену, а отже, буде сприятиме збільшенню нецентросиметрії молекули наповнювача і таким чином буде сприяти збільшенню НЛО активності хромофору на молекулярному рівні. Методами ІЧ-спектроскопії 1Н та 13С ЯМР спектроскопії доведено, що модифікування вихідного хромофору відбулось в положення С8 молекули 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавону та було отримано 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавон-8-сульфонову кислоту. Було встановлено, що за рахунок хімічного модифікування 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавону шляхом введення сульфогрупи в положення С8 даного хромофору, молекули наповнювача існують у вигляді іонної форми. Вперше показано, що таке хімічне модифікування кверцетину приводить до збільшення гіперполяризовності хромофору, а отже в свою чергу і макроскопічних НЛО властивостей полімерних матеріалів, за рахунок асоціації іонів наповнювача. Встановлена залежність макроскопічної поляризовності другого порядку (□(2)) полімерних нанокомпозитів із 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавону і 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавон-8-сульфонової кислоти від концентрації наповнювача. Показало, що така залежність для полімерних нанокомпозитів із 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавону має екстремальний характер. Тобто за концентрації наповнювача 30 мас.% значення □(2) максимальне. Збільшення концентрації хромофору призводить до зменшення значень параметру □(2). З іншого боку, збільшення концентрації 3,5,7,3/,4/-пентагідроксифлавон-8-сульфонової кислоти (до 50 мас.%) в полімерній матриці приводить до збільшення значення □(2). Цей факт свідчить про те, що збільшення розмірів асоціатів іонних хромофорів, більш сприяє дипольній орієнтації під впливом поляризації під впливом струму коронного розряду, ніж молекул хромофорів у нейтральній формі. Також досліджено вплив концентрації даних хромофорів в полімерній матриці на такі властивості, як: спектральні, теплофізичні, структурні властивості, а також дослідження певних експлуатаційних властивостей, які є визначальними для матеріалів, що використовуються у фотоніці та оптоелектроніці. Проведені дослідження дають перспективу ефективного використання епоксидних полімерів наповнених хромофорами флаванольного типу у різноманітних застосуваннях у фотоніці та оптоелектроніці. Ключові слова: епоксидний полімер, флаванол, нелінійно-оптична активність, полімерний композитний матеріал, фотостійкість.

2. The dissertation is devoted that polymer NLO nanocomposite materials filled with flavonol-type chromophores are promising materials for various applications in photonics and optoelectronics, and their study is relevant and of both scientific and practical interest.The thesis deals with the creation of cross-linked epoxy polymer nanocomposites with nonlinear optical (NLO) properties based on diglycidyl ether of bisphenol doped by chromophores flavone type. The optical, thermal, morphological authorities on nonlinear optical parameters of epoxy nanocomposites was investigated and the optimal filler concentration with which the NLO activity of such materials does not reduce was found. In the thesis for the first time, polymer materials with high nonlinear-optical activity based on epoxy polymer doped by natural flavones (quercetin, fizetin), and chemically modified natural flavone (sulfoquercetin) were obtained. With of UV-vis spectroscopy and a scanning electron microscopy, it was found that the molecules of flavones, under the conditions of synthesis of the polymer matrix of the filler molecule, exist in at least two forms: neutral and anions. Quantitative redistribution between these two forms with increasing concentration of filler in the polymer matrix leads to different positions of the resulting maximum on the spectral curves. The performed quantum-chemical calculations of molecular hyperpolarizability (□) showed that the greatest value of this parameter has quercetin (□ = 108,2×10-40 m4/V). Therefore, in this work for increase the NLO activity of the filler, a chemical modification of quercetin was developed due to the introduction of its chemical structure of the sulfogroup, which by its nature has a Hydrogen acceptor, and therefore will contribute

to increasing the NLO activity of the chromophores at the molecular level. Using IR spectroscopy and 13C NMR spectroscopy, it has been proved that the modification occurred in the C8 position of the quercetin molecule. It has been found that due to the chemical modification of quercetin by introducing a sulfo group in the C8 position of the chromophore molecule filler exist in ionic form. It was shown for the first time that such chemical modification of quercetin leads to an increase the chromophores hyperpolarization and in turn leads to increase the macroscopic NLO properties of polymer materials due to the aggregation of filler ions. The dependence of second order macroscopic polarizability (□(2)) of polymer nanocomposites with quercetin and sulfoquercetin on filler concentration was established. It was shown that such a dependence for polymer nanocomposites with quercetin is of extreme nature. That is, the value of □(2) at the filler concentration 30 wt. % is maximal. A chromophore concentration increase leads to decrease values of the parameter □(2). On the other side, an increase of the sulfoquercetin concentration (up to 50 wt. %) in the polymer matrix results in an increase of the value of □(2). This fact indicates that an increase of the ion chromophores agglomerates size is more conducive to dipole orientations under the influence of polarization under the action of a corona discharge current than the chromophore molecules in a neutral form. The effect of the concentration of these chromophores in a polymer matrix on properties such as spectral, thermophysical, structural properties was investigated of certain exploitation properties that are determinant for materials used in photonics and optoelectronics. The carried out researches give the possibility of effective use of epoxy polymers doped by flavanol type chromophores in various NLO applications in photonics and optoelectronics. Key words: epoxy polymers, flavones, nonlinear optical activity, polymer composition materials, photostability

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. Мішуров Дмитро Олексійович
2. Mishurov Dmytro Oleksijovych

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.06

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. Дорошенко Андрій Олегович
2. Doroshenko Andrii O.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

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. Мишак Володимир Дмитрович
2. Myshak Volodymyr D

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Корогодська Алла Миколаївна

2. Korohodska Alla M.

Кваліфікація: д. т. н., 05.17.11

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. Черкашина Ганна Миколаївна

2. Cherkashyna Hanna

Кваліфікація: к.т.н., 05.17.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Шабанова Галина Миколаївна

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Шабанова Галина Миколаївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.