Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101481

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Крайнюкова Ніна Василівна

2. Krainyukova Nina Vasylivna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.07

Назва наукової спеціальності: Фізика твердого тіла

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 11-05-2021

Спеціальність за освітою: фізика

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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 64.175.03

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19, 29.19.04, 29.35.41

Тема дисертації:

1. Кріогенні наноструктури у відкритій та обмеженій геометрії: вплив нанорозміру на структурні властивості
2. Cryogenic nanostructures in open and confined geometry: nanosize effect on the structural properties

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено встановленню взаємозв'язку між розмірами наноструктурованих об'єктів та їх властивостями: структурою, фазовими станами і перетвореннями у атомних та молекулярних наносистемах, сорбційними спроможностями карбонових стільників, а також вивченню характеристик поверхонь затверділих газів і перовскітів. У дисертації вперше відтворено повну послідовність найбільш енергетично вигідних структур атомарних нанокластерів у діапазоні розмірів від 13 до ~105 атомів. Зокрема встановлено, що при розмірах N ~ 105 атомів формується ГЩУ структура у відповідності з прямими теоретичними передбаченнями, що також підтверджено у рентгенівському дослідженні при сплавленні кластерів аргону. В експериментах на кластерах квантового об'єкту дейтерію, занурених в надплинний гелій, виявлено, що кластери з числом молекул N < 300 втрачають свою стабільність навіть нижче □ точки, а кластери розміром меншим за 100 молекул є нестабільними навіть у основному стані. Досліджена релаксація поверхневих

структур азоту і окису вуглецю показала дуже низьку імовірність формування великих кластерів азоту з осями симетрії п'ятого порядку. У експериментах з нанокластерними конденсатами N2O на підкладці виявлено формування впорядкованої по асиметричних кінцях лінійних молекул структури P213, а також знайдено два різні типи аморфних станів, один є подібним до замороженої рідини, а другий є полікластерною формацією. У експериментах з дифракції швидких електронів на відбиття вперше отримано повний образ квазідвовимірної оберненої поверхневої решітки. Знайдено ефект стиснення кристалічної решітки паралельно поверхні незбуреного кристала SrTiO3 в інтервалі температур 5–300 K, що посилюється при зниженні температури. Синтезовано нову вуглецеву стільникову структуру з низькою густиною, отриману з сублімованого у вакуумі графіту, у якій стінки між комірками сформовано лише з одного шару графену. Знайдено методики насичення нової коміркової вуглецевої структури – карбонових стільників рекордними кількостями важчих інертних газів Ar, Kr і Xe, які становлять 4 – 7 відсотків від кількості атомів вуглецю у матриці. Виявлено двоступеневий характер десорбції двоокису вуглецю з вуглецевих стільників, який пов'язується з різною взаємодією молекул з матрицею у вузьких і широких каналах. Встановлено, що завдяки сильному зв'язуванню зі стінками каналів десорбція CO2 зі стільникової структури не завершується навіть при температурі, майже втричі вищій, ніж температура сублімації з плоских підкладок у вакуумі.

2. The dissertation is devoted to establishing the correlation between the sizes of nanostructured objects and their properties: the structure, phase states and transformations in atomic and molecular nanosystems, sorption capacities of carbon honeycombs, as well as studying the effect of geometrically spatial limitation on the surface characteristics of solidified gases and perovskites. It is shown that this correlation has a significant effect on the behavior of nanoscale formations depending on the type of interatomic interaction. To attain the goal of the work, new methods of performing and analyzing the experiment, as well as the new theoretical approaches, were developed. The dissertation established for the first time the complete sequence of the most energetically favorable structures of atomic nanoclusters in a wide size range from 13 to ~ 105 atoms, in which the advantage of decahedra over icosahedra at cluster sizes N ~ 2000 atoms was shown. It was demonstrated that the obtained macroscopic samples of noble gas nanoclusters by the methods of impurity–helium mixtures injection into superfluid helium consist of weakly interacting nanoclusters with fivefold symmetry axes, such as icosahedra and decahedra. Considering the optimized hcp clusters, it was found for the first time that at sizes N ~ 105 atoms, the hcp structure forms in accordance with direct theoretical predictions. This result is confirmed in the experimental X–ray study of the evolution of macroscopic ensembles of argon nanoclusters stabilized in superfluid helium during cluster growth outside liquid helium. Due to the proposed original theoretical approach based on the study of the quasiharmonic instability of crystals of inert elements Ne, Ar, Kr and Xe and their surfaces, the reasons and mechanisms leading to transformations in systems of atomic nanoclusters that are impossible in bulk crystals have been clarified. In the experimental study of clusters of a quantum object – deuterium, immersed in superfluid helium, it was found that at temperatures close to the □ point, small clusters with the number of molecules N < 300 lose their stability, and clusters less than 100 molecules in size are unstable even in the ground state. The studied relaxation of the surface structures of nitrogen and carbon monoxide has shown a very low probability of the formation of large nitrogen clusters with fivefold symmetry axes, such as icosahedra and decahedra. This conclusion was confirmed by known experiments. In the low–temperature nanocluster condensates of N2O on a substrate, the formation of the most energetically favorable structure P213, which is ordered by the asymmetric ends of linear molecules, was found. When studying low–temperature condensates of nitrous oxide N2O with asymmetric molecules, two fundamentally different types of amorphous states were found, one is similar to a frozen liquid, and the other is a polycluster formation. By means of the reflection high–energy electron diffraction (RHEED) method a full image of quasi–two–dimensional surface inverse lattice of strontium titanate in the form of rods perpendicular to single–crystal surfaces and modulated in thickness was obtained for the first time. The effect of contraction of the crystal lattice parallel to the surface of an unexcited SrTiO3 crystal in the temperature range 5 – 300 K was found. This effect increases with lowering temperature. A new low–density carbon honeycomb structure is synthesized, it is obtained from vacuum sublimated graphite, in which the walls between cells are formed from only one graphene layer. Methods of saturation of a new honeycomb carbon structure –

carbon honeycombs with record amounts of sorbed heavy inert gases Ar, Kr and Xe, which are 4– 7 percents of the number of carbon atoms in the matrix, have been found and applied. A two – stage character of carbon dioxide desorption from carbon honeycombs was found. It is associated with different interactions of molecules with the matrix in narrow and wide channels. It was found that, due to the strong binding to the channel walls, the desorption of CO2 from the honeycomb structure is not completed even at temperatures almost three times higher than the temperature of sublimation from flat substrates in vacuum.

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. Крайнюкова Ніна Василівна
2. Krainyukova Nina Vasylivna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.09

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. Крайнюкова Ніна Василівна
2. Krainyukova Nina Vasylivna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.09

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. Бойко Юрій Іванович
2. Boyko Yuriy I.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Малихін Сергій Володимирович
2. Malykhin Sergey V

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Притула Ігор Михайлович

2. Prytula Ihor M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.10

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 Найдюк Юрій Георгійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Найдюк Юрій Георгійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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