Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004875

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хутько Марія Михайлівна
2. Mariia M. Khutko

Кваліфікація: аспірант, 105

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0005-9641-0497

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Дата захисту: 15-10-2026

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика та наноматеріали

Місце роботи здобувача: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, 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): PhD 16967

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, 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 напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.31.23, 29.31.26, 29.41.01, 29.41.05

Тема дисертації:

1. ЛОКАЛІЗОВАНИЙ ПОВЕРХНЕВИЙ ПЛАЗМОННИЙ РЕЗОНАНС В НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМАХ З РОЗВИНУТОЮ МОРФОЛОГІЄЮ ДІЕЛЕКТРИЧНОГО ПОКРИТТЯ

2. Localized surface plasmon resonance in nanoscale systems with developed dielectric coating morphology.

Реферат/анотація:

1. Основні розділи дисертаційної роботи: У першому розділі проведено аналітичний огляд сучасного стану досліджень явищ ЛППР у плазмонних наночастинках (НЧ) і наноструктурах (НС) Ag та Au і явища ППФ у нанокомпозитах, що містять флюорофори та діелектричні спейсери. Проаналізовано теоретичні підходи до моделювання ЛППР (теорія Мі, методи дискретних диполів та скінченних різниць у часовій області) та ППФ (метод граничних елементів, електростатичне наближення, метод множинних мультипольних полів, дипольне наближення на основі діадної функції Гріна). Розглянуто методи синтезу колоїдних Ag НЧ, їх стабілізації полімерними оболонками, зокрема термочутливим полімером pNIPAM (для систем доставки ліків), та застосування Ag НС у тонкоплівкових нанокомпозитах. Досліджено фізико-хімічні властивості флюорофора пірену, механізми плазмон- флюорофорної взаємодії, а також аналітичні методи детектування

нітровмісних сполук із застосуванням молекулярно-імпринтованих полімерів (МІП). □ У другому розділі викладено теоретичні основи явищ ЛППР та ППФ, детально описано використані математичні моделі, методики виготовлення 3 зразків і комплексної їх характеризації. Для моделювання спектрів екстинкції Ag НЧ з полімерним покриттям застосовано теорію Мі для сферичних частинок з оболонкою з урахуванням розмірного ефекту обмеження довжини вільного пробігу електронів. Для розрахунку спектрів ППФ плазмонних наночипів використано підхід на основі діадної функції Гріна в рамках розв'язання об'ємних рівнянь Ліппмана-Швінгера з урахуванням розподілу за розміром Ag НС. Описано методики фото- та термоініційованого синтезу колоїдних Cit Ag НЧ, Cit Au НЧ/НО та зародкових Ag НЧ з покриттям pNIPAM, а також формування нанокомпозитів на основі ПВП, пірену, МІП та Ag/Au НС. У третьому розділі представлено результати синтезу, розрахунку та оптимізації параметрів зародкових Ag НЧ з покриттям pNIPAM (за допомогою АСМ, DLS та комп'ютерного моделювання ЛППР). Встановлено, що використання спеціалізованого ініфертера з тіольною групою спрощує стадії RAFT-полімеризації та дозволяє формувати термочутливу оболонку pNIPAM безпосередньо під час синтезу Ag НЧ. Проаналізовано вплив концентрацій NIPAM та ініфертера на стабільність НЧ завдяки формуванню електростатичних хелатних комплексів. Визначено оптимальний час УФ-опромінення при синтезі для запобігання агрегації та забезпечення максимального виходу частинок з вираженим відгуком ЛППР. Показано потенціал таких наноструктур як шаблонів для синтезу Cit Au НО та розробки систем доставки ліків. □ У четвертому розділі висвітлено результати чисельного моделювання та експериментальних досліджень явища ППФ для модельного флюорофора поблизу Ag НС. Розраховано оптимальну відстань між НС та флюорофором (~15 нм), довжину хвилі збудження та геометричні параметри Ag наночипа, що забезпечує збільшення фактора ППФ приблизно у 120 разів порівняно з базовою конфігурацією (з максимальними значеннями ФПФ до ~1000). Експериментально доведено, що оптимальне співвідношення компонентів нанокомпозиту ПВП-пірен-Ag НЧ становить 1:1:1 на скляній підкладці (яка є на 29–52% ефективнішою за паперовий носій). Розроблені чутливі елементи забезпечили межу виявлення нітроароматичних сполук (4-НФ, 4-НТ, 1,4-ДНБ) на рівні 10–9 - 10–16 М у рідкому середовищі та гасіння флюоресценції від ~1 мг 4-НФ у газовій фазі. Встановлено, що інтеграція МІП підсилює гасіння ППФ до 2 разів завдяки селективному захопленню молекул цільових аналітів порами МІП. Основні наукові та практичні результати роботи: 1. Розроблено одностадійний метод фотоініційованого синтезу стабільних зародкових Ag НЧ з термочутливим покриттям pNIPAM із використанням тіолвмісного ініфертера (через механізми RAFT-полімеризації). 2. Теоретично та експериментально обґрунтовано оптимальні геометричні та спектральні параметри плазмонних наночипів на основі Ag НС для досягнення максимального фактора підсилення флюоресценції (до ~1000 разів при оптимізації довжини хвилі збудження та товщини діелектричного спейсера ~15 нм). 3. Створено високочутливі та селективні тонкоплівкові чутливі елементи на основі нанокомпозитів ПВП-пірен-Ag НЧ та МІП для оптичного детектування нітроароматичних вибухонебезпечних та токсичних речовин із ультранизькою межею виявлення (10–9 -10–16 М).

2. The dissertation is devoted to the theoretical and experimental study of the physical phenomena of localized surface plasmon resonance in plasmonic noble metal (silver and gold) nanostructures with polymer coatings and plasmon-enhanced fluorescence in polymer nanocomposites, as well as the development of selective and highly sensitive optical sensor system elements based on them. Chapter 1 provides a comprehensive literature review of the current state of research on LSPR phenomena in plasmonic Ag and Au nanoparticles (NPs) and nanostructures (NSs), as well as PEF phenomena in nanocomposites containing fluorophores and dielectric spacers. Theoretical approaches to modeling LSPR (Mie theory, discrete dipole approximation [DDA], and finite-difference time-domain [FDTD] methods) and PEF (boundary element method, electrostatic approximation, multiple multipole method, and dipole approximation based on the dyadic Green's function) are analyzed. Methods for synthesizing colloidal Ag NPs, their stabilization with polymer shells—specifically the thermosensitive polymer pNIPAM for drug delivery systems—and the application of Ag NSs in thin-film nanocomposites are reviewed. The physicochemical properties of the pyrene fluorophore, plasmon– fluorophore interaction mechanisms, and analytical methods for detecting nitro□containing compounds using molecularly imprinted polymers (MIPs) are investigated. Chapter 2

presents the theoretical foundations of LSPR and PEF phenomena, detailing the mathematical models, sample preparation techniques, and comprehensive characterization methods used. To model the extinction spectra of Ag NPs with polymer coatings, Mie theory for core-shell spherical particles was applied, taking into account the size effect of electron mean free path limitation. To calculate the PEF spectra of plasmonic nanochips, an approach based on the dyadic Green's function within the solution of Lippmann–Schwinger volume integral equations was used, considering the size distribution of Ag NSs. Procedures for photo- and thermo-initiated synthesis of colloidal Cit-Ag NPs, Cit-Au NPs/NRs, and seed Ag NPs coated with pNIPAM are described, along with the fabrication of nanocomposites based on PVP, pyrene, MIP, and Ag/Au NSs. Chapter 3 delivers the results of the synthesis, theoretical calculation, and parameter optimization of seed Ag NPs coated with pNIPAM (using AFM, DLS, and LSPR computer simulation). It was established that using a specialized thiol-containing iniferter simplifies the RAFT polymerization steps and enables the formation of a thermosensitive pNIPAM shell directly during Ag NP synthesis. The effects of NIPAM and iniferter concentrations on NP stability were analyzed through the formation of electrostatic chelate complexes. The optimal UV irradiation time during synthesis was determined to prevent aggregation, increase the yield of seed Ag NPs, and ensure pronounced LSPR response compared to thermal synthesis. The potential of these nanostructures as templates for synthesizing Cit-Au nanoshells (NSs) and developing drug delivery systems is demonstrated. Chapter 4 highlights the results of numerical modeling and experimental studies of PEF for the model fluorophore near Ag NSs. The optimal distance between NSs and the fluorophore (~15 nm), excitation wavelength, and geometric parameters of the Ag nanochip were calculated, providing a PEF enhancement factor increase of approximately 120 times compared to the baseline configuration (reaching maximum PEF values up to ~1000). Experimentally, the optimal component ratio for the PVP□pyrene-Ag NP nanocomposite was found to be 1:1:1 on a glass substrate (which proved 29–52% more efficient than a paper carrier). The developed sensing elements achieved a limit of detection (LOD) for nitroaromatic compounds (4-NP, 4-NT, 1,4-DNB) in the range of 10–9-10–16 in the liquid phase and fluorescence quenching starting at ~1 mg of 4-NP in the gas phase. Integrating MIPs was found to enhance PEF quenching by up to 2 times due to selective molecule capture within the MIP pores.Key Scientific and Practical Results: 1. Developed a single-step photo-initiated synthesis method for stable seed Ag NPs with a thermosensitive pNIPAM coating using a thiol-containing iniferter via RAFT polymerization mechanisms. 2. Theoretically and experimentally substantiated the optimal geometric and spectral parameters of Ag NS-based plasmonic nanochips to achieve a maximum fluorescence enhancement factor (up to ~1000 times by optimizing excitation wavelength and dielectric spacer thickness to ~15 nm). 3. Created highly sensitive and selective thin-film sensing elements based on PVP-pyrene-Ag NP and MIP nanocomposites for optical detection of nitroaromatic explosive and toxic substances with ultra-low limits of detection (10–9 -10–16).

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- A. Lopatynskyi, V. Lytvyn, M. Khutko, A. Pinchuk, V. Chegel. Ag nanoarray sensors: Theoretical frameworks for surface plasmon enhancement of fluorescence signals. Sensors and Actuators A: Physical 2025, 389, 116558.
- M.M. Khutko, A.M. Lopatynskyi, V.K. Lytvyn, P.V. Demydov, V.I. Chegel. Synthesis and optical characterization of seed silver nanoparticles in situ coated with poly-(N-isopropylacrylamide). Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics 2025, 28 (4), 449-455.
- P.V. Demydov, A.M. Lopatynskyi, V.V. Kuznietsov, V.K. Lytvyn, M.M. Khutko, V.I. Chegel. Ag nanoparticles concentration impact on plasmon-enhanced fluorescence of pyrene in solution and nanocomposite thin film. J. Nano- Electron. Phys. 2025, 17, 06010.

- P.V. Demydov, V.V. Kuznietsov, M.M. Khutko, V.K. Lytvyn, I.I. Hudzenko and A.M. Lopatynskyi. Fluorescence-based trace detection of explosives: current state and perspective for ultrasensitive portable technique via plasmonic enhancement. Methods Appl. Fluoresc. 2026, 14, 032001.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K. and Chegel V.I. Synthesis of thermoresponsive polymer pNIPAM for drug delivery system using gold nanostructures // 11th International Conference on "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO-2023). – Bukovel, Ukraine. – 16-19 August 2023. – P. 310.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K. and Chegel V.I. Engineering thermoresponsive polymer coating on plasmonic nanostructures for drug delivery applications // 24th International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science - SPO 2023 "STAND WITH UKRAINE". – Kyiv, Ukraine. – 17-18 November 2023. – P. 5-6.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K. and Chegel V.I. Synthesis of thermoresponsive polymer pNIPAM for drug delivery system during formation of 9 seed silver nanoparticles // Young scientists conference on semiconductor physics "Lashkaryov's readings - 2024". – Kyiv, Ukraine. – 4 April 2024. – P. 81-82.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K. and Chegel V.I. Seed silver nanoparticles coating with thermoresponsive polymer pNIPAM: synthesis and characterization // 12th International conference "Nanotechnologies and nanomaterials" (NANO-2024). – Uzhhorod, Ukraine. – 21-24 August 2025. – P. 326.
- Khutko Maria, Lopatynskyi Andrii, Lytvyn Vitalii, Chegel Volodymyr. Peculiarities of seed silver nanoparticles synthesis with thermoresponsive polymer pNIPAM coating // 3rd International Research and Practice Conference «Nanoobjects & Nanostructuring». – Lviv, Ukraine. – 7-10 October 2024. – P. 12-13.
- Хутько М.М., Лопатинський А.М., Литвин В.К., Демидов П.В., Гудзенко І.І. та Чегель В.І. Спектральні та морфологічні властивості наночипів на основі наноструктур шляхетних металів для плазмон-підсиленого флюоресцентного сенсора вибухових речовин. // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання 2025". – Київ, Україна. – 3-4 квітня 2025 р. – с. 80-81.
- Хутько М.М., Лопатинський А.М., Литвин В.К., Демидов П.В., Гудзенко І.І., Кузнєцов В.В. та Чегель В.І. Наноструктури шляхетних металів з полімерним покриттям для плазмон-підсиленої флюоресценції. // Optical Biosensing Workshop 2025. – Kyiv, Ukraine. – 25 April 2025.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K., Demydov P.V., Hudzenko I.I., Balayeva N.O., Zahn D.R.T., Chegel V.I. Spectral and morphological properties of noble metal nanocomposites for a plasmon-enhanced fluorescent explosives sensor // 4th edition conference on Global Nanotechnology (NanoSeries – 2025). – Valencia, Spain. – 17-20 June 2025. – P. 446-447.
- Khutko M.M., Lopatynskyi A.M., Lytvyn V.K., P. V. Demydov and Chegel V.I. Photochemical synthesis of silver nanoparticles coated with poly(Nпisopropylacrylamide): characterization and simulation // 13th International conference "Nanotechnologies and nanomaterials" (NANO-2025). – Bukovel, Ukraine. – 20-23 August 2025. – P. 471.
- Хутько М.М., Лопатинський А.М., Литвин В.К., Демидов П.В., Балаєва Н.О., Цан Д.Р.Т. та Чегель В.І. Фотохімічний синтез наночастинок срібла, вкритих полі(N-ізопропілакриламідом): морфологічна і спектральна характеризація та моделювання // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання 2026". – Київ, Україна. – 2-3 квітня 2026 р. – с. 76-77 .

Наукова (науково-технічна) продукція: пристрої; технології; матеріали; методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість: поліпшення стану навколишнього середовища; поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0121U108511 0123U103004 0124U001089 0124U003780 0126U002776

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лопатинський Андрій Миколайович

2. Andrii M. Lopatynskyi

Кваліфікація: к.ф.-м.н., с.д., 01.04.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6847-892X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Демченко Валерій Леонідович

2. Valerii L. Demchenko

Кваліфікація: к.ф.-м.н., д.х.н., пров.н.с., с.д., 01.04.19, 02.00.06

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9146-8984

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона Національної академії науки України

Код за ЄДРПОУ: 05416923

Місцезнаходження: вул. Казимира Малевича, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Булавінець Тетяна Олександрівна

2. Tetiana Bulavinets

Кваліфікація: д.філософ, доц., 153

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6898-3363

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Капуш Ольга Анатоліївна
2. Olha A. Kapush

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.21

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2643-1995

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Євтух Анатолій Антонович
2. Anatoliy Evtukh

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3527-9585

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Борковська Людмила Володимирівна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Борковська Людмила Володимирівна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Пономаренко Валентина Володимирівна
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна