Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003199

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-10-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: №155-ОД від 16.12.2024

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гурова Діана Євгеніївна
2. Diana Hurova

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8054-4758

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: 39026 Фізика (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 28-11-2024

Спеціальність за освітою: 104 — Фізика та астрономія

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, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 64.175.015_ID_7039

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, Харків, Харківський р-н., 61103, 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: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.04, 29.19.07

Тема дисертації:

1. Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот 14N2 і 15N2 та полімери

2. Features of the structure of solid molecular compounds: Nitrogen 14N2 and 15N2 and polymers

Реферат:

1. У дисертаційній роботі представлені результати структурних досліджень окремих молекулярних сполук у кристалічному та аморфному станах. З аналізу інтенсивностей рентгенівських дифрактограм твердих 14N2 та 15N2 (твердих азотів) в орієнтаційно упорядкованій фазі отримано температурні залежності середньоквадратичних відхилень молекул азоту з вузла кристалічної ґратки та параметра орієнтаційного порядку. Використовуючи метод побудови функції радіального розподілу та квантовомеханічні розрахунки, досліджуються зміни структури полімерної плівки полі-4,4'-діфініленоксід-піромеллітімід під впливом зовнішніх факторів (одновісного розтягу та всебічного стискання). Методами рентгенівської дифракції та оптичної мікроскопії розглядаються структурні характеристики композитів на основі епоксидної смоли з домішками вуглецевих наноструктур (кополімери, одно- та багатостінні вуглецеві нанотрубки, оксид

графену). У вступі наведено обґрунтування актуальності теми дисертаційної роботи як у фундаментальному, так і у прикладному аспектах. Визначено мету, завдання, об'єкти та методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувачки та апробацію результатів дисертації. Також описано структуру та обсяг представленої дисертаційної роботи. У першому розділі представлено огляд літератури. Розглянуті властивості молекулярних сполук з Ван дер Ваальсовим зв'язком між молекулами, до яких відносяться кріокристали та деякі полімери. Для молекулярних кристалів характерний перехід з орієнтаційно розупорядкованого, в орієнтаційно упорядкований стан (порядок-безлад). У низькотемпературній фазі молекули орієнтуються вздовж відповідних кристалографічних напрямків, та здійснюють трансляційні та лібраційні коливання. Розглянуто дослідження твердого азоту 14N2 в орієнтаційно упорядкованій фазі, а також теоретичні та експериментальні роботи з визначення параметра орієнтаційного порядку. Представлено проведені раніше структурні та механічні дослідження поліімідних плівок під дією зовнішніх сил. Наведено роботи з вивчення композитів з додаванням вуглецевих наноструктур. На даний момент велика увага приділена аналізу механічних властивостей даних композитів, причому існує невелика кількість робіт по дослідженню структури цих речовин. У другому розділі детально описано методику проведення рентгеноструктурних досліджень кристалічних та аморфних сполук, оптичних досліджень епоксидної смоли з домішками вуглецевих наноструктур. Також описано методику проведення низькотемпературного експерименту (отримання in situ зразків в рентгенівському кріостаті), вимірювання та стабілізації температури. Третій розділ присвячено структурним дослідженням та аналізу температурної залежності інтенсивностей рентгенівського розсіювання на кристалічних 14N2 та 15N2 в орієнтаційно упорядкованій фазі. Наведено підхід для опису трансляційних та лібраційних коливань молекул азоту з експериментальних рентгенівських даних. З даних рентгеноструктурного аналізу вперше була отримана температурна залежність середньоквадратичної амплітуди відхилення молекул 14N2 та 15N2 з вузла кристалічної ґратки в орієнтаційно упорядкованій фазі. Вперше побудована температурна залежність параметра орієнтаційного порядку в низькотемпературній фазі 15N2. Визначено, що температура, при якій молекули 15N2 починають активний переорієнтаційний рух, становить близько 45 К. У четвертому розділі розглянуто дослідження змін у структурі полімерних плівок полі-4,4'-діфініленоксід-піромеллітімід під впливом одновісного розтягу та витримці за гелієвих температур. Методом побудови функцій радіального розподілу та за допомогою квантовомеханічних розрахунків (метод DFT) показано, що при одновісному розтягуванні плівки змінюється сама конфігурація молекул за рахунок змін кутів між двома ароматичними кільцями. Натомість, всебічне стискання не призводить до помітних змін в геометрії молекул, а відбувається взаємне упорядкування полімерних ланцюгів. П'ятий розділ присвячено дослідженню композитів на основі епоксидних смол з домішками кополімеру, одно- та багатостінних вуглецевих нанотрубок та оксиду графену. З отриманих даних рентгенівських досліджень встановлено, що введення домішок вуглецевих наноструктур (~ 1 % ваг.) не призводить до утворення кристалічної фази. Введення домішок одно- та багатостінних вуглецевих нанотрубок спричиняють зменшенню міжмолекулярної взаємодії між молекулами в матриці композиту, причому дифракції від «фази» вуглецевих нанотрубок не спостерігається. Додавання оксиду графену до епоксидної матриці призводить до утворення багатофазної речовини, значення області ближнього порядку для домішок оксиду графену складає близько 20 Å. Оптичні дослідження композиту з домішками оксиду графену вказують на нерівномірний розподіл кластерів графену у зразку, що може бути пов'язане як з особливостями приготування зразка, так і з проведенням механічних випробувань.

2. The dissertation presents the results of the structural studies of individual molecular compounds in crystalline and amorphous states. From the analysis of the intensities of X-ray diffractograms of solid 14N2 and 15N2 (solid nitrogen) in the orientationally ordered phase, the temperature dependences of the mean square displacement of nitrogen molecules from the lattice site and the orientational order parameter were obtained. Using the radial distribution function construction method and quantum mechanical calculations, changes in the structure of the poly (4,4'-oxydiphenylene-pyromellitimide) polymer film under the external influence (uniaxial stretching and comprehensive compression) are investigated. The structural characteristics of composites based on epoxy resin

with carbon nanostructures impurities (copolymers, single- and multi-walled carbon nanotubes, graphene oxide) are studing using the X-ray diffraction method and optical microscopy. The introduction provides a rationale for the relevance of the dissertation topic in both fundamental and applied aspects. The purpose, tasks, objects and methods of research are determined. The scientific novelty and practical significance of the obtained results are formulated. Information about publications, personal contribution of the researcher and results approval of the dissertation is provided. The first chapter presents a review of the literature. The properties of molecular compounds, including cryocrystals and polymers, are examined. Molecular crystals are characterized by a transition from an orientationally disordered state to an orientationally ordered state (order-disorder). In the low-temperature phase, the molecules are oriented along the corresponding crystallographic axis and exhibit translational and librational vibrations. The study of solid nitrogen 14N2, as well as theoretical and experimental work on the determination of the orientational order parameter is considered. Previously conducted structural and mechanical studies of polyimide films under external influences are presented. Works on the study of composites with the addition of carbon nanostructures are given. At the moment, much attention is paid to the analysis of the mechanical properties of these composites, and there is a small number of works on the study of these structure. In the second chapter, the methodology of conducting X-ray structural studies of crystalline and amorphous compounds, as well as optical studies of epoxy resin with carbon nanostructure additives, is described in detail. The chapter also outlines the methodology for performing low-temperature experiments (obtaining in situ samples in an X-ray cryostat). The third chapter is dedicated to structural studies and the analysis of X-ray reflection intensities from 14N2 and 15N2 in the orientationally ordered phase. A novel approach for describing the translational and librational vibrations of nitrogen molecules from experimental X-ray data is presented. The temperature dependence of the mean square displacement of 14N2 and 15N2 molecules from the lattice site in the orientationally ordered phase was obtained from the X-ray data. The temperature dependence of the orientational order parameter in the low-temperature 15N2 phase was constructed. It was determined that the temperature at which 15N2 molecules begin active reorientational movement is about 45 K. The fourth chapter focuses on the study of structural changes in 4,4'-oxydiphenylene-pyromellitimide polymer films under uniaxial tension and comprehensive compression. Using the radial distribution function method and quantum mechanical calculations (DFT method), it was shown that under uniaxial tension, the molecular configuration transforms due to changes in the angles between the two aromatic rings. Comprehensive compression doesn’t lead to noticeable changes in the geometry of the molecules but results in the mutual ordering of polymer chains. The fifth chapter is dedicated to the study of composites based on epoxy resins with impurities of copolymer, single- and multi-walled carbon nanotubes, and graphene oxide. From the obtained X-ray data, it was established that the addition of carbon nanostructure impurities (~1% by weight) doesn’t lead to the formation of a crystalline phase. The addition of single- and multi-walled carbon nanotubes influence on intermolecular interactions between the matrix molecules, diffraction from the carbon nanotubes "phase" isn’t observed. The addition of graphene oxide to the epoxy matrix leads to the multiphase substance formation, the value of the short-range order region for graphene oxide is about 20 Å. Optical studies of the composite with graphene oxide impurities indicate an uneven distribution of graphene clusters in the sample, which may be related both to the peculiarities of the sample preparation and to the conduct of mechanical testing

Державний реєстраційний номер ДіР: 117U002290, 0122U001504, 0121U111445

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: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Alekseeva L. A., Syrkin E. S., Hurova D. E., Aksenova N. A., Galtsov N. N. and Feodosyev S. B. Translational vibrations in □-N2 from x-ray data. Low Temperature Physics. 2022. Vol. 48, No. 2. P. 113–116. https://doi.org/10.1063/10.0009289, Q3.
- 2. Hurova D. E., Erenburg A. I., Aksenova N. A., Galtsov N. N. and Zinoviev P. V. Orientational order parameter and mean square displacement of solid heavy nitrogen in the low-temperature phase. Experimental data. Low Temperature Physics. 2023. Vol. 49, No. 10. P. 1184–1189. https://doi.org/10.1063/10.0020873, Q3.
- 3. Hurova D. E., Cherednichenko S. V., Aksenova N. A., Vinnikov N. A., Dolbin A. V. and Galtsov N. N. Structural studies of epoxy resin with impurities of carbon nanostructures. Low Temperature Physics. 2024. Vol. 50, No. 2. P. 167– 170. https://doi.org/10.1063/10.0024329, Q3.
- 4. Hurova D. E., Geidarov V. G., Braude I. S., Aksenova N. A., Stepanian S. G., Adamowicz L. and Galtsov N. N. Structural studies of amorphous polymer films: Experiment and calculation. Low Temperature Physics. 2024. Vol. 50, No. 3. P. 272–278. https://doi.org/10.1063/10.0024972, Q3.
- 5. Alekseeva L.A., Syrkin E.S., Hurova D.E., Aksenova N.A., Galtsov N.N. Mean squared displacement of molecules in the low-temperature phase of solid Nitrogen//in Book of Abstracts «II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics», 2021, Kharkiv, Ukraine, P. 109.
- 6. Hurova D.E., Geidarov V.G., Aksenova N.A., Galtsov N.N. Scattering by molecules of the Kapton H polymer. Amorphous films//in Book of Abstracts «II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics», 2021, Kharkiv, Ukraine, P. 184.
- 7. Hurova D.E., Erenburg A.I., Aksenova N.A., Alekseeva L.A., Galtsov N.N., Temperature behavior of the thermal factor of scattering in the ordered phase of solid Nitrogene-15, //in Book of Abstracts “Multiscale Phenomena in Condensed Matter online conference for young researchers (YOUNG MULTIS 2023)”, Krakiv, Poland (online), P.73.
- 8. Hurova D.E., Erenburg A.I., Aksenova N.A., Galtsov N.N., Determination of orientational order parameter in the low-temperature phase of solid Nitrogen□15//in Book of Abstracts «II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics (CM & LTP 2023) », 2023, Kharkiv, Ukraine P. 104.
- 9. Hurova D.E., Geidarov V.G., Aksenova N.A., Braude I.S., X-ray studies of the P-MA polyimide films under external action//in Book of Abstracts “8th international conference Nanobiophysics: fundamentl and applied aspects, 2023, Kyiv, Ukraine, P.93.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 117U002290, 0122U001504, 0121U111445

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кривчіков Олександр Іванович

2. Oleksandr I. Kryvchikov

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, с.н.с., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5375-439X

Додаткова інформація: Scopus Author ID 35611706800; Web of Science Researcher ID: AAD-3502-2020; https://scholar.google.com.ua/citations?user=Yp1Lz1EAAAAJ&hl=ru&oi=ao

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, Харків, Харківський р-н., 61103, 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. Довбешко Галина Іванівна
2. Halyna Dovbeshko

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, с.н.с., 01.04.07, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7701-0106

Додаткова інформація: Scopus Author ID 14029629500; Web of Science Researcher ID DVX-7482-2022

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 46, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Першин Юрій Павлович
2. Yurii Pershyn

Кваліфікація: д. т. н., к. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9092-0078

Додаткова інформація: Scopus Author ID 7004174066; Web of Science Researcher ID GCW-9031-2022

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

Код за ЄДРПОУ: 02071180

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Саган Володимир Володимирович
2. Volodymyr Sahan

Кваліфікація: к. ф.-м. н., с.д., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9257-6776

Додаткова інформація: Scopus Author ID 8605227700; Web of Science Researcher ID FSG-3164-2022

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, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гламазда Олександр Юрійович
2. Oleksandr Glamazda

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3048-8732

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6507904190; Web of Science Researcher ID AAD-5367-2020

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, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Карачевцев Віктор Олексійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Карачевцев Віктор Олексійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Калиненко Олександр Миколайович
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна