

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U005539

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 26-12-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Лопатіна Ярослава Юріївна
2. Lopatina Yaroslava Yuriyivna

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.04

**Назва наукової спеціальності:** Фізична електроніка

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 19-12-2019

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 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):** Д 26.159.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 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 НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.35.43

**Тема дисертації:**

1. Дослідження самоорганізації органічних молекул на атомно-гладких поверхнях.
2. Self-organization of Organic Molecules on Atomically-Flat Surfaces.

**Реферат:**

1. Метою роботи є встановлення закономірностей самоорганізації моношарових органічних плівок залежно від внутрішньої структури молекул, функціональних груп та типу підкладки. Структура пакування молекул досліджувалась методом сканувальної тунельної мікроскопії (СТМ) на інтерфейсі рідина-тверде тіло. Встановлено, що на поверхні Au(111) молекули п-гексаконтану (C<sub>60</sub>H<sub>122</sub>) утворюють два типи смектичного пакування – прямокутне (стабільне) і косокутне (метастабільне). При адсорбції на графіті виявлено ефект колективної перебудови упорядкованого моношару C<sub>60</sub>H<sub>122</sub>. Встановлено вплив типу підкладки на фрагментацію другого шару C<sub>60</sub>H<sub>122</sub>. Встановлено, що структура пакування молекул похідних алкілоксібензену на графіті визначається положенням та типом функціональних груп. Виявлено ефект перебудови моношару, який супроводжується зсувом латеральнопротяжних масивів молекул. Досліджено хемосорбовані плівки тіолвісних сполук на атомно-гладкій поверхні Au(111). Встановлено, що молекули 11-меркаптодеканової кислоти та дитіоли (1,9-нонандитіол, 1,4-бутандитіол) утворюють рядкову структуру за рахунок взаємодії периферійних груп. Показано, що хімічна активність моношарів дитіолів залежить від

технології приготування, зокрема від тривалості витримки поверхні Au(111) в розчині. Вперше отримано моношари діамтан-тіолів (C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>-SH) на Au(111). Встановлено, що структура плівок залежить від положення SH-групи на каркасі молекули. У моношарі діамтан-1-тіолу виявлено поліморфізм. Для моношарових плівок 3-арілпропантіолів-1 на поверхні Au(111) встановлено, що характер адсорбції (фіз./хімадсорбція) визначається розміром ароматичного ядра молекули. В моношарах триоктил-триазатриангулену на Au(111) виявлено поліморфізм, що є результатом балансу взаємодії π-електронних систем молекул і підкладки. В моношарах сабфталоціаніну виявлено ближній порядок. Для вакуумно напорошених об'ємних плівок рубрену встановлено, що реконструйована поверхня Au(111) спричиняє орієнтаційну дію.

2. The purpose of this work is to establish the regularities of self-assembly of organic molecules on atomically-flat surfaces. The main attention is focused on the structure of monolayer films depending on the internal structure of the molecules, functional groups and type of substrate. The structure of monolayers has been investigated by scanning tunneling microscopy (STM) at the liquid-solid interface. The atomically-flat surfaces of graphite and Au(111) were used as substrates. It has been established that n-hexacontane (C<sub>60</sub>H<sub>122</sub>) molecules form two types of smectic packing on the Au(111) surface - rectangular and oblique. The oblique packing corresponds to the metastable state, the rectangular - to the stable state. The transition from the metastable state to the stable state occurs with the formation of an intermediate nematic phase. STM revealed the effect of collective rearrangement of the ordered C<sub>60</sub>H<sub>122</sub> monolayer on graphite. It has been suggested that the process starts with the growth of domain with different direction. Defects play a key role in this process. Clusters of the second layer C<sub>60</sub>H<sub>122</sub> on graphite and Au (111) substrates were investigated. The influence of the substrate on the fragmentation of the second C<sub>60</sub>H<sub>122</sub> layer is shown. Thus, the graphite substrate determines the orientation and size of clusters, while the Au (111) substrate determines orientation. Structure of self-assembled monolayers of alkylxybenzene derivatives has been established on graphite. The transformation of 2-amino-1-dodecyloxy-5-nitrobenzene monolayer was observed. Rearrangement was followed by displacement of laterally extended molecular array. Chemisorbed monolayer films of alkanethiol derivatives SH-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-R were investigated. It was found that 11-mercaptoundecanol (-OH) molecules form hexagonal structure. For the molecules with the carboxyl group (11-mercaptodecanoic acid) and dithiols (1,9-nonanedithiol, 1,4-butanedithiol) row structure was observed. The structural difference was explained by the association of molecules, interacting through terminal -COOH or -SH groups. It has been identified that the chemical activity of dithiol monolayers depends on the preparation technology, in particular on the duration of the Au(111) surface in the solution. The observed effect is explained by the formation of a disulfide (S-S) bond between adjacent molecules in the monolayer. The effect can be used in technologies based on the adsorption properties of organometallic interfaces. The monolayers of diamantane-thiols (C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>-SH) on Au(111) were investigated by the STM for the first time. It was found that the structure and stability of the films depend on the position of SH-group. A polymorphism was revealed in the monolayer of diamantane-1-thiol. It has been established that the nature of adsorption (phys./chemisorption) in the monolayers of 3-arylpropanethiol-1 (3-naphthalene-1-yl-propane-1-thiol and 3-phenanthrene-9-yl-propane-1-thiol) on the Au(111) surface is determined by the size of the aromatic core of the molecule. Two types of packaging have been identified in the trioctyl-triazatriangulen monolayers on Au(111). Polymorphism results from the balance of the interactions of π-electronic systems of molecules and the substrate. It has been suggested that the formation of two structures is governed by a probability factor. A short-range order was found in monolayers of subphthalocyanine. The lack of long-range order is caused by incommensuration between monolayer and substrate. It has been found that the reconstructed surface of Au(111) exerts an orientation effect on the growth of the vacuum-evaporated rubrene films. The preferred direction for film growth is <112>.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Марченко Олександр Анатолійович

2. Marchenko Oleksandr A.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.18

**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. Кордюк Олександр Анатолійович

2. Kordyuk Alexander A.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.22

**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. Борщягівський Євген Григорович

2. Bortchagovsky Eugene G.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.05

**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**

Яценко Леонід Петрович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Яценко Леонід Петрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.