Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U100544

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-08-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Яремчук Дмитро Любомирович
2. Yaremchuk Dmytro L.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 27-07-2023

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.156.004

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.17.25, 29.19.37, 30.15.37, 30.19.59, 31.15.35

Тема дисертації:

1. Моделювання функціональних полімерних матеріалів із магнето- та оптично- активними частинками та їх відгуку на зовнішні поля

2. Modeling of functional polymer materials with magneto- and photo- active particles and their responses to the external fields

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена моделюванню функціональних полімерних матеріалів та їх відгуку на відповідні зовнішні стимули. Зокрема, розглянуті магнеточутливі еластомери на основі частинок карбонільного заліза, фоточутливі рідкокристалічні полімерні щітки, що містять азобензенові хромофори, а також термочутливі полімерні щітки з властивостями полі(N-ізопропілакриламіду). Дослідження магнеточутливих еластомерів (МЧЕ) на основі частинок карбонільного заліза складається з декількох частин.

Було здійснене порівняння потенціалів магнітної взаємодії різного типу. Показано, що врахування взаємного намагнічення між парою диполів в принципі дозволяє опис колоноподібних структур. Детальніша модель, що базується на розв'язку рівняння Лапласа для двох магнітних сфер, використана для отримання густини магнітної енергії сфероїдального МЧЕ у наближенні парних взаємодій. З використанням формалізму мікрофсери отримано вираз для розмагнічувального фактора, що збігається з відомим у теорії суцільного середовища. Досліджено вплив розподілу частинок на ефект магнетострикції МЧЕ. Розглянуті просторові впорядкування частинок у вузлах SC, FCC, BCC і HCP ґраток. Фактор магнетострикції виявився залежним від об'ємної частки частинок, що не спостерігалось для випадку взаємодіючих диполів. Також помічено залежність фактора магнетострикції від орієнтації гратки відносно напрямку магнітного поля, що видно на відмінностях у поведінці МЧЕ із FCC і HCP типами граток. Спостерігаються гігантські від'ємні значення фактора магнетострикції для SC, FCC і HCP граток при наближенні частинок на відстань близьку до їх діаметра, що може бути наслідком використаних наближень. Інший функціональний матеріал: полімерна щітка із рідкокристалічних полімерів, що містять у своїх бічних групах азобензенові хромофори. Така щітка може формувати одновісну планарну фазу (ОПФ) з фотокерованим напрямком нематичного директора, що є важливим для приповерхневого впорядкування низькомолекулярних рідких кристалів. Проведено дослідження умов формування ОПФ за допомогою методів огрубленої молекулярної динаміки. Показано, що якщо всі хромофори перебувають у немезогенному стані cis, впорядкованої планарної фази не виникає у всьому досліджуваному діапазоні густин щітки. У випадку, коли всі хромофори перебувають у мезогенному стані trans, самоорганізація призводить лише до виникнення локального впорядкування. Зрештою, якщо орієнтація хромофорів коротко наводиться орієнтуючим полем, що імітує поляризоване світло, отримується стабільна ОПФ у визначеному діапазоні густини щітки і температур. Проведено моделювання для такої рідкокристалічної щітки як функціонального матеріалу здатного адсорбувати наночастинки (НЧ), які декоровані ліґандами з рідкокристалічними групами. Розглянуто адсорбцію НЧ за умови дії світла видимої ділянки спектра. На основі аналізу профілів густини НЧ встановлено існування характерної густини щітки для оптимальної адсорбції НЧ на ній, що пояснюється зростанням кількості адсорбованих частинок із зростом кількості хромофорів у щітці, як наслідок зростання густини самої щітки. А також подальшим зменшенням адсорбованих НЧ, через неможливість для них проникнути всередину густої щітки. Адсорбція НЧ підтверджується дослідженням середньоквадратичного відхилення НЧ, яке вказує на знерухомлення адсорбованих НЧ у щітці, але не у об'ємі. Також, використовуючи метод дисипативної динаміки, досліджено модель термочутливої функціональної поверхні у вигляді полімерної щітки, що має властивості полі(N-ізопропілакриламіду) (ПНІПАМ). Гідрофільність чи гідрофобність молекул ПНІПАМ нижче T<LCST і вище T>LCST нижньої критичної температури розчинності відображено через параметризацію взаємодії полімер-розчинник згідно роботи Сото-Фіґероа та ін. Скейлінгові закони радіуса гірації та інших характеристик для окремого ланцюжка непогано узгоджуються із типовими показниками для полімерів у доброму, при T<LCST, і поганому, T>LCST, розчинниках. Для полімерної щітки модель передбачає існування оптимальної густини пришпилення полімерів $\sigma g \approx 0.3$, за якої зміна характеристик форми індивідуальних ланцюжків є максимальною при переході через LCST. Такий ефект пояснено, в рамках теорії Александра і де Жена, різними густинами перекриття для двох температурних режимів та витісненням розчинника з густої щітки.

2. This thesis is devoted to the study of the response of functional polymer materials to the external stimuli. The magneto-sensitive elastomers filled with carbonyl iron particles, photo-responsive liquid crystalline polymer brush with azobenzene chromophores, and thermo-responsive polymer brush with the properties of poly(N-isopropylacrylamide) were considered. Study of the properties of magneto-sensitive elastomer (MSE) consist of several parts. Different models with their magnetic energies of interaction between pairs of particles were compared. It was found that mutual magnetisation of dipoles is enough to describe column-like structures. More detailed model, derived from the solution of the Laplace equation for two magnetizable spheres, was used in order to describe density of the magnetic energy of spheroidal MSE in pairwise approximation. It was shown, using micro-sphere formalism, that demagnetization factor is the same in such approach as in the theory of continuous media. Dependency of MSE's magnetostriction on the spatial distribution of magnetic particles was considered.

The spatial distributions of the magnetic particles considered were SC, FCC, BCC and HCP lattices. It was found that magnetostriction factor depends on the volume fraction of the particles, which was not observed for dipoles. The magnetostriction factor is dependent on orientation of the lattices with respect to the magnetic field, which is exemplified by the differences between HCP and FCC lattices. This model predicts very large but finite negative values of magnetostriction factor in the case of FCC, HCP and SC lattices and distances between nearest neighbors close to the diameter of the particle, which is likely a result of used approximations. The next functional polymer material considered was liquid crystalline brush (LCPB), consisting of polymers of comb-like architecture with azobenzene chromophores in their side-chain groups. Uniaxial planar (UPL) arrangement for chromophores in such a brush with photo-controlled director of nematic order is possible. The exposure to UV light, with all chromophores in cis polar non-mesogeneic state, does not lead to UPL formation. Similarly, during the Vis. light exposure, with all chromophores in trans mesogenic non-polar state, self-assembly results in local ordering only. Contrary to that, the short exposure to the aligning field, mimicking the polarized light, allowed to obtain UPL phase in the appropriate range of grafting densities and temperatures. The modeling of the similar LCPB as adsorbing surface for nanoparticles (NP), decorated with polymer chromophore ligands was also considered. The adsorption was taking place under Vis. light irradiation. It was found to depend on grafting density non-monotonically with the presence of some optimal grafting density. At first, the efficiency increased with the density due to mere increase in the number of chromophores in the brush, later the brush becomes dense and steric effects did not allow NP to penetrate inside the brush. These findings were supplemented with the study of mean square displacement of NP inside brush, which show them to be frozen, contrary to the NP in the bulk. Also, using dissipative particle dynamics, the model of polymer brush with properties of poly(N-isopropylacrylamide) (PNIPAM) was considered. Change of hydrophilic character of polymer below T<LCST to hydrophobic above T>LCST lower critical solution temperature was mapped to the interactions between polymer and solvent particles according to Soto-Figueroa et al. The single polymer chain scaling laws were checked for radius of gyration and other characteristics, it was shown to be in good agreement with good solvent behavior for T<LCST and slightly smaller compared with the poor solvent behavior when T>LCST. For the polymer brush, the existence of optimal grafting density □g≈0.3 was found, for which changes of the shape characteristics of individual polymers was maximal at transition of LCST. This phenomena can be explained, within the formalism of Alexander and de Gennes, by the different overlap grafting densities at two temperature regimes and by expulsion of the solvent from the dense brush.

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. Ільницький Ярослав Миколайович

2. Ilnytskyi Jaroslav M.

Кваліфікація: 01.04.24

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маркович Богдан Михайлович

2. Markovych Bogdan

Кваліфікація: 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лебовка Микола Іванович

2. Lebovka Nikolai Ivanovich

Кваліфікація: 01.04.14

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головач Юрій Васильович
2. Holovatch Yurii V.

Кваліфікація: 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Держко Олег Володимирович
2. Derzhko Oleh V.

Кваліфікація: 01.04.02

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Мриглод Ігор Миронович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Мриглод Ігор Миронович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.