

Рецензія

провідного наукового співробітника відділу молекулярної біофізики
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, доктора фізико-математичних наук

ГЛАМАЗДИ Олександра Юрійовича

на дисертаційну роботу **ГУРОВОЇ Діани Євгеніївни**

«Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот $^{14}\text{N}_2$ і $^{15}\text{N}_2$ та полімери», яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

за спеціальністю 104 «фізика та астрономія»

(галузь знань 10 «Природничі науки»)

Актуальність обраної теми дисертації

Встановлення структури нековалентно-зв'язаних молекулярних комплексів та пошук методології який спростить ідентифікацію структури таких комплексів є важливою проблемою сучасної фізики. Вирішення цієї проблеми є актуальним завданням, яке має як практичну так і теоретичну цінність для молекулярної фізики, фізики твердого тіла так і біофізиці та фармацевтики.

В своїй дисертації, Гурова Діана Євгеніївна дотримується комплексного підходу з використанням експериментальних та теоретичних методів для дослідження структури деяких молекулярних кристалів, опису структури поліімідної плівки та полімерних композитів.

Результати дослідження Гурової Д.Є. дозволять розширити розуміння формування полімерних композитів, що може відкрити нові можливості для створення ефективних композитних матеріалів з покращеними властивостями. Описані в дисертаційній роботі підходи можуть бути застосовані для опису структурних характеристик молекулярних сполук.

Загальна характеристика роботи та отриманих у ній результатів

Загальний обсяг дисертаційної роботи Гурової Діани Євгеніївни становить 135 сторінок та складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку

використаних джерел з 145 найменувань та двох додатків, 46 рисунків, 8 таблиць.

У **вступі** наведено обґрунтування актуальності теми дисертаційної та визначено основну мету, завдання, об'єкти, предмети та методи дослідження. Авторкою сформульовано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувачки та апробацію результатів дисертації.

У **першому розділі** представлено огляд літератури. Розглянуті властивості молекулярних кріокристалів. 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. Такий складний коливальний рух молекули в кристалі ускладнює правильну інтерпретацію дифракційних картин, отриманих від молекулярного кристала. Розглянуто структурні та механічні дослідження поліімідних плівок під дією зовнішніх сил.

У **другому розділі** наводиться опис методики проведення рентгеноструктурних досліджень кристалічних та аморфних сполук, оптичних досліджень епоксидної смоли з домішками вуглецевих наноструктур. Описано методологію отримання кріокристалів та проведення низькотемпературних досліджень.

Третій розділ присвячено структурним дослідженням кріокристалів в орієнтаційно упорядкованій фазі. Наведено підхід для опису трансляційних та лібраційних коливань молекул азоту з експериментальних рентгенівських даних. Вперше отримана температурна залежність амплітуди трансляційних коливань молекулярних кріокристалів за даними оригінальних рентгенівських досліджень. Вперше знайдено параметр орієнтаційного порядку та середньоквадратичні відхилення молекул $^{14}\text{N}_2$ та $^{15}\text{N}_2$ з положення рівноваги

та знайдено кореляцію між експериментальними та теоретичними дослідженнями.

У **четвертому** розділі розглянуто вплив одновісного розтягу та витримки при гелієвих температурах на структуру полімерних плівок. Для опису рентгенівських дифрактограм застосовувався метод побудови функцій радіального розподілу атомів. Також були проведені квантовомеханічні *ab-initio* розрахунки та оптимізація геометрії мономеру макромолекули 4,4'-діфеніленоксид-піромеллітімід.

П'ятий розділ присвячено дослідженню композитів на основі епоксидних смол з домішками кополімеру, одно- та багатостінних вуглецевих нанотрубок та оксиду графену. З аналізу рентгеноструктурних даних встановлено, що введення домішок вуглецевих наноструктур (~ 1 % ваг.) не призводить до утворення кристалічної фази, але призводить до зменшення міжмолекулярної взаємодії між полімерними молекулами в композитній плівці. Додавання оксиду графену до епоксидної матриці призводить до утворення багатофазного композиту зі значенням області когерентного розсіювання близько 20 Å.

Апробація та достовірність основних результатів дисертації

Основні результати та наукові положення дисертації викладено в 9 наукових працях: 4 статті опубліковано в рейтингових реферованих виданнях та 5 тезах. Що свідчить про детальну апробацію отриманих даних та запропонованих підходів для вирішення основних завдань дисертаційної роботи. Авторка особисто представляла результати дисертаційної роботи на п'яти міжнародних наукових конференціях та симпозіумах. Результатом активної роботи Гурової Діани Євгеніївни є вельми цікаве дослідження, яке стосується актуальних питань сучасної фізики молекулярних структур, що активно обговорюються. Робота поєднує в собі експериментальні та теоретичні підходи, що взаємодоповнюють один одного.

Зауваження до дисертаційної роботи

1. На Рис 3.1, 3.2 наведено рентгенівські дифрактограми, отримані від азоту $^{14}\text{N}_2$ та $^{15}\text{N}_2$ в орієнтаційно упорядкованій фазі. На Рис 3.1. наведена експериментальна дифрактограма, у той час, як на Рис. 3.2. вона представлена у загальному вигляді. З чим це пов'язано?
2. У розділі 3 не було проведено порівняння параметра орієнтаційного порядку для $^{14}\text{N}_2$ та $^{15}\text{N}_2$, у той час, як значення середньоквадратичних відхилень молекул з вузла кристалічної ґратки наведено. На яких об'єктах дослідження можна застосовувати підхід для побудови параметра орієнтаційного порядку та середньоквадратичних відхилень?
3. В тексті дисертаційної роботи не вказано, чому в досліджуваних зразках поліімідної плівки не спостерігалась кристалічна фаза, як в початкових зразках, так і при зовнішньому впливі?
4. В дисертаційній роботі в переліку умовних позначень наведені як скорочення термінів українською, так і англійські скорочення, наприклад ПОП (параметр орієнтаційного порядку), та RDF (функція радіального розподілу), та РМ (поліімід, що складається з макромолекул полі-4,4'-діфеніленоксид-піромеллітімід;).
5. Позначення осей на рисунках наведені в деяких випадках українською мовою, в деяких англійською, те саме стосується прізвищ авторів, на роботи яких посилається дисертантка. Також в тексті присутні стилістичні та граматичні помилки.

Всі наведені вище зауваження не впливають на високу оцінку даної дисертаційної роботи та мають рекомендований характер, не применшують її наукову новизну, не ставлять під сумнів результати та актуальність роботи.

Загальний висновок та оцінка дисертації

Підсумовуючи, вважаю що дисертаційна робота Д.Є. Гурової «Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот $^{14}\text{N}_2$ і $^{15}\text{N}_2$ та

полімери» є цілісною, актуальною та завершеною роботою, з використанням як експериментальних методів, так із застосуванням теоретичних підходів для розрахунку. Дана робота відповідає вимогам пп. 7, 8, 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженим Постановою Кабінету Міністрів України № 44 від 21 січня 2022 року», зі змінами від 12 березня 2022 р. № 341, від 19 травня 2023 р. №502 та від 03 травня 2024 р. №507, а здобувачка Гурова Д.Є. заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 - «Фізика та астрономія», в галузі знань 10 - «Природничі науки».

Рецензент:

провідний науковий співробітник
відділу молекулярної біофізики
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
старший дослідник



Олександр ГЛАМАЗДА



Гламazzi О.Ю.
СВІДЧУЮ

Заступник секретаря ФТІНТ
ім. Б.І. Веркіна НАН України
фізико-математичних наук

Кашнікєв О.В.