

РІШЕННЯ СПЕЦІАЛІЗОВАНОЇ ВЧЕНОЇ РАДИ ПРО ПРИСУДЖЕННЯ СТУПЕНЯ ДОКТОРА ФІЛОСОФІЇ

Спеціалізована вчена рада ДФ 64.175.015 Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України, м. Харків, прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» на підставі прилюдного захисту дисертації «Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот $^{14}\text{N}_2$ і $^{15}\text{N}_2$ та полімери» 28 листопада 2024 року.

Гурова Діана Євгеніївна, 1997 року народження, громадянка України, освіта вища: закінчила у 2019 році Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна та здобула ступінь магістра за спеціальністю «Фізика та астрономія».

Навчалася в аспірантурі Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України з 2020 р. Успішно виконала освітньо-наукову програму підготовки доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія». Дисертація подана до захисту під час навчання в аспірантурі Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України.

Дисертаційну роботу виконано у відділі теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник відділу теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України Кривчіков Олександр Іванович.

Здобувачка має 4 статті за темою дисертації у міжнародних виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз (Scopus, Web of Science), що належать до квартилю Q3 (4 статті) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank, 0 монографій:

1. Alekseeva L. A., Syrkin E. S., **Hurova D. E.**, Aksenova N. A., Galtsov N. N. and Feodosyev S. B. Translational vibrations in α -N₂ from x-ray data. Low Temperature Physics. 2022. Vol. 48, No. 2. P. 113–116.
<https://doi.org/10.1063/10.0009289> (Scopus, кuartиль 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> (Scopus, кuartиль 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> (Scopus, кuartиль 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> (Scopus, кuartиль Q3)

У дискусії взяли участь голова і всі члени спеціалізованої вченої ради:

1. Опонент **Першин Юрій Павлович**, доктор технічних наук, кандидат фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник кафедри фізики металів та напівпровідників Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут" надав позитивний відгук із зауваженнями:

1) З тексту дисертації не зрозуміло, для чого потрібно було проводити квантово-механічні розрахунки з оптимізації геометрії ланки макромолекули

4,4'-діфініленоксид-піромеллітімід. Що в даному випадку мається на увазі під терміном оптимізація молекули?

2) У розділі 5 представлені дифрактограми композитів на основі епоксидної смоли з додаванням вуглецевих наноструктур. Пропоную навести перелік всіх експериментальних дифракційних картин для зразків епоксидна смола + одна багатостінні вуглецеві нанотрубки та кополімер. Також на рис. 5.1-5.2 представлені дифракційні картини з вирахуванням фону, у той час як дифракційні картини для зразків (епоксидна смола)+(оксид графену) наведені без вирахування фону. Або мають бути більш коректні підписи до рисунків, або наводити експериментальні дифрактограми, які приведені до одного вигляду.

3) У розділі 5 для оцінки областей когерентного розсіювання застосовувалась формула Шеррера, в якій за розширенням піку визначається середній розмір кристаліту. Це не є коректним підходом для оцінки областей когерентного розсіювання для аморфних зразків, в даному випадку використовується розрахунки за допомогою побудови координаційних сфер, або функції радіального розподілу атомів.

Зауваження до оформлення та стилістики:

1. У тексті дисертаційної роботи є різне позначення вектору зворотної ґратки, наприклад: \mathbf{q} , \mathbf{Q} , \vec{Q} . Присутнє повторення формул в тексті в Розділі 1 та Розділі 3 (формули 1.8 та 3.7). Є схожі позначення для різних параметрів: θ' – характеристична температура кристалу і θ – кут (с. 72-74).

2. Підписи на осях деяких рисунків наведено англійською мовою (рисунки 3.1, 3.2, 3.4, 4.2, 4.3, 5.2, 5.6, 5.8, 5.9).

3. Таблиця 4.2 (с. 91): не вказано що означають цифри «39».

4. Використовуються позасистемні одиниці вимірювання відстаней: ангстреми замість нанометрів.

Наведені зауваження не впливають на загальну позитивну оцінку дисертації. Науковий рівень дисертації є високим, отримані результати не викликають сумніву щодо їх достовірності, а висновки роботи є обґрунтованими.

2. Опонент **Довбешко Галина Іванівна**, доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник відділу фізики біологічних систем Інституту фізики Національної академії наук України надала позитивний відгук із наступними зауваженнями:

1) В тексті дисертації немає пояснення, з чим пов'язано вибір даних речовин для дослідження і відсутня кореляція та/або антикореляція між кристалічним та аморфним станом, що бажано було б зробити з аналізу рентгеноструктурних даних та похибок визначення положення атомів для двохатомного кристалу та багатоатомного полімеру. Так, наприклад, біологічні полімери мають точність визначення положення атомів 4-7 Å, а деякі прості речовини 0.01Å і краще.

2) У третьому розділі вказується, що була отримана температурна залежність середньоквадратичних відхилень молекул $^{14}\text{N}_2$ та $^{15}\text{N}_2$ з вузла кристалічної ґратки. Треба писати про відхилення атомів, а не молекул, див. цитована авторами стаття В.І. Пересади (Peresada V.I., Syrkin E.S. On the calculation of rms atom displacements in a crystal lattice. Surface Science. 1976. Vol. 54, No. 2. P. 293–302).

3) Визначення полімерів в тексті дисертації не є коректним, що призвело до помилок в написанні назви досліджуваного полімеру полі-4,4'-оксидифенілен-піромелітіміду з 4 граматичними і однією смисловою помилкою (стор. 4, 44, 61, 84-100, 116).

4) Висновок про те, що в композиті смола з нанотрубками присутня тільки одна фаза не є коректним. Чутливості різних методик мають певні межі і тому таке твердження треба перевіряти за допомогою інших методів.

5) Синтаксичні та граматичні помилки зустрічаються по тексту.

Всі недоліки, зазначені вище, не применшують загальної високої оцінки роботи та носять характер рекомендацій для подальших досліджень.

3. Рецензент **Гламазда Олександр Юрійович**, доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник відділу молекулярної біофізики Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна

Національної академії наук України надав позитивну рецензію із зауваженнями:

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.

4. Рецензент Саган Володимир Володимирович, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник відділу теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного

інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України надав позитивну рецензію на роботу, із зауваженням:

1) На мою думку, слід було б детальніше проаналізувати і обговорити процеси, що відбуваються у вільних плівках РМ при одновісному розтягуванні за кімнатних температур, та при всебічному стисканню – витримці при гелієвих температурах; зважаючи на те, що у роботі наведено аналогічні результати досліджень властивостей поліімідних плівок, які були одержані іншими авторами.

2) Відомо, і дисертантка це відзначила в роботі, що існує багато видів карбонових наноструктур. Але, на жаль, в тексті дисертації не міститься обґрунтування вибору нанотрубок, кополімеру та відновленого оксиду графену, як домішок в полімерних матеріалах на основі епоксидної смоли. Доречно було б аргументувати їх вибір пославшись на попередні дослідження фізичних властивостей самих наповнювачів.

3) У тексті дисертації зустрічається вживання слів росіянізмів, граматичні та стилістичні помилки, зокрема, в деяких місцях відсутні або зайві розділові знаки та некоректна побудова речень.

Однак, наведені зауваження не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи та не знижують високий науковий рівень роботи. Вони є дискусійними і спрямовані, швидше, на окреслення шляхів подальших досліджень, доцільність продовження яких не викликає сумніву.

5. Голова ради Карачевцев Віктор Олексійович, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу молекулярної біофізики Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України дав позитивну оцінку роботі, без зауважень.

Загальна оцінка роботи і висновок. Дисертація Гурової Діани Євгеніївни на тему «Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот $^{14}\text{N}_2$ і $^{15}\text{N}_2$ та полімери» є актуальним завершеним науковим дослідженням.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню структурних властивостей молекулярних речовин у кристалічному та аморфному станах. Зокрема, розглядаються фізичні властивості твердих азотів $^{14}\text{N}_2$ та $^{15}\text{N}_2$ в орієнтаційно упорядкованій фазі, зміни структури полімерної плівки 4,4'-oxydiphenylene-*pyromellitimide* під впливом зовнішніх факторів, а також структурні характеристики композитів на основі епоксидної смоли з домішками вуглецевих наноструктур (кополімери, одно- та багатостінні вуглецеві нанотрубки, оксид графену).

Була отримана температурна залежність амплітуди трансляційних коливань $^{14}\text{N}_2$ в орієнтаційно упорядкованій фазі за даними оригінальних рентгенівських досліджень. Для $^{15}\text{N}_2$ в орієнтаційно упорядкованій фазі було розраховано параметр орієнтаційного порядку та середньоквадратичні відхилення молекули з вузла ґратки на підставі прямих експериментальних методів. Було показано, що температура, при якій молекула $^{15}\text{N}_2$ починає, в середньому, «вільно» обертатись, вище температури фазового переходу, і становить близько 45 К.

Було встановлено характер змін, що відбуваються в макромолекулах полі-4,4'-діфеніленоксид-піромеллітімід полімерної плівки під дією зовнішнього механічного впливу. З використанням методу побудови функцій радіального розподілу та на підставі квантовомеханічних розрахунків показано, що при одновісному розтягуванні плівки трансформується 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.

Проведені структурні дослідження композитів на основі епоксидної смоли з додаванням вуглецевих наноструктур дозволили стверджувати, що введення домішок вуглецевих нанотрубок призводить до зменшення (послаблення) взаємодії молекул в матриці композиту, при цьому композити з домішками вуглецевих нанотрубок є однофазною речовиною. Додавання оксиду графену до епоксидної матриці призводить до утворення багатофазної

речовини. Розмір області ближнього порядку для фази оксиду графену в композиті складає близько 20 Å.

Загалом, наукові положення, що винесені на захист, добре обґрунтовані та узгоджуються з уже наявними як теоретичними, так і експериментальними (нейтронографія, ядерний квадрупольний резонанс) підходами, а їх достовірність була підтверджена незалежним рецензуванням, та публікаціями наукових статей, які лягли в основу даної дисертації, у наукових фахових журналах, які включено до міжнародних наукометричних баз Web of Science та Scopus. Окрім цього, основні результати та висновки, що увійшли в дисертаційну роботу, неодноразово обговорювалися на міжнародних наукових конференціях, семінарах та школах.

Результати досліджень, наведені у дисертаційній роботі та опубліковані у наукових статтях, були отримані дисертанткою у співавторстві, зі значним внеском здобувачки. Робота виконана з дотриманням усіх вимог академічної доброчесності. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело. За кількістю і рівнем публікацій, апробацією на міжнародних конференціях дисертаційна робота відповідає вимогам «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженому постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44 зі змінами.

Рада вважає, що дисертація Гурової Діани Євгеніївни на тему «Особливості структури твердих молекулярних сполук. Азот $^{14}\text{N}_2$ і $^{15}\text{N}_2$ та полімери», що подана на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» є завершеним самостійним науковим дослідженням, сукупність результатів якого розв'язує наукове завдання, що має істотне значення для галузі знань 10 «Природничі науки», а за актуальністю, науковою новизною і практичною цінністю відповідає вимогам чинного законодавства України, «Порядку

підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у закладах вищої освіти (наукових установах)» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 23.03.2016 р. № 261 та «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12.01.2022 р. № 44 зі змінами від 12 березня 2022 р. № 341, від 19 травня 2023 р. №502 та від 03 травня 2024 р. №507, а здобувачка Гурова Діана Євгеніївна заслуговує присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Результати відкритого голосування:

«За» - 5 членів ради,

«Проти» - 0 членів ради,

«Утримались» - 0 членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада ДФ 64.175.015 присуджує Гуровій Діані Євгеніївні ступінь доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Голова разової

спеціалізованої вченої ради,

доктор фіз.-мат. наук,

чл.-кор. НАН України

професор



підпис гр. *Карачевцев В.О.*
ЗАСВІДЧУЮ
Учений секретар ФТІНТ
ім. Б.І. Веркіна НАН України
кандидат фізико-математичних наук
Косенченко О.І.

Віктор КАРАЧЕВЦЕВ