

## ВІДГУК

офіційного опонента 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»)

У роботі Гурової Діани Євгеніївни основна увага зосереджена на структурних дослідженнях речовин з домінуючим внеском молекулярної взаємодії у кристалічному та аморфному стані та їх порівнянні. Прикладом упорядкованої кристалічної структури є речовини так званих твердих азотів  $^{14}\text{N}_2$  та  $^{15}\text{N}_2$ , що існують в кристалічному стані тільки при низьких температурах (порядку  $-200^\circ\text{C}$ ) і є **актуальною** і вдалою модельною системою для низькотемпературних фізичних досліджень. Аморфний стан представлений в роботі поліімідом полі-4,4'-оксидифенілен-піромелітимід (каптон), який є термостійким і гнучким матеріалом в широкому діапазоні температур ( $-273$ - $400^\circ\text{C}$ ) і **актуальний** для використання в приладах, що експлуатуються в екстремальних умовах, включаючи воєнні. Додатково були досліджені більш складні композитні структури на основі епоксидної смоли з домішками вуглецевих наноструктур, що покликані покращити їх експлуатаційні характеристики.

Дисертанткою були використані експериментальні методики рентгеноструктурного аналізу та оптичної мікроскопії та розрахунки методом квантової хімії.

Робота виконана у Відділі теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна

НАН України згідно відомчих тем: «Термодинамічні властивості наноструктурованих систем, композитів, молекулярних твердих тіл в екстремальних умовах низьких температур» (номер держреєстрації 117U002290, шифр Ф 9-11, 2017 – 2021 рр.) та «Теплофізичні властивості, структура та низькотемпературна динаміка наноструктур, кристалічних і аморфних молекулярних систем в умовах екстремальних температур» (номер держреєстрації 0122U001504, шифр Ф 9-12, 2022 – 2026 рр.) та в рамках наукового проекту НФДУ «Квантове тунелювання коливальних збуджень в теплопровідності кристалічних та аморфних матеріалів і композитів» (номер держреєстрації 0121U111445, шифр 2020.02/0094, 2020 – 2023 рр.)

**Наукова новизна** роботи полягає в тому, що вперше було визначено температурну залежність амплітуди трансляційних коливань в кристалічній ґратці  $^{14}\text{N}_2$  та  $^{15}\text{N}_2$  в орієнтаційно упорядкованій фазі та значення параметра орієнтаційного порядку для твердого азоту  $^{15}\text{N}_2$ .

**Важливими і цікавими** є результати структурних деформаційних перебудов за низьких температур в полімерних плівок полі-4,4'-оксидифенілен-піромелітіміду. Показано, що при одновісному розтягуванні змінюється конфігурація молекул, а всебічне стискання упорядковує полімерні ланки, практично не змінюючи геометрію молекул.

**Наукове значення** результатів роботи про особливості кристалічної та аморфної фази має **фундаментальний** характер, а висновки про зміну структури полімерних плівок під впливом температури та механічних навантажень мають **прикладний** зміст і можуть бути використані у створенні нових матеріалів для воєнної промисловості.

**Структура дисертації.** У відповідності до вимог робота складається з анотації, вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел, 2 додатків з опублікованих робіт та матеріалів конференції. Робота містить 46



рисунків, 8 таблиць та список використаних джерел з 148 найменувань на 15 сторінках, що разом складає 135 сторінок.

**У вступі** наведено всі необхідні формальні відомості.

**Перший розділ** присвячено огляду літератури, а саме, властивостям досліджуваних молекулярних кристалів та полімерів та розрахункам інтенсивності рентгенівського розсіювання в молекулярних кристалах.

**У другому розділі** описано методики досліджень, а саме методики рентгенівської спектроскопії, оптичної мікроскопії та квантово-хімічних розрахунків.

**У третьому розділі** представлено результати дослідження структури твердого азоту  $^{14}\text{N}_2$  та  $^{15}\text{N}_2$ , описано отримані температурні залежності середньоквадратичних відхилень та параметри орієнтаційного порядку для цих кристалів.

**Четвертий розділ** описує структурні характеристики полімерних плівок полі-4,4'-оксидифенілен-піромелітіміду при механічних навантаженнях з використанням функції радіального розподілу та квантово-хімічних розрахунків.

**В п'ятому розділі** описуються структури та властивості композитів на основі епоксидної смоли з вуглецевими наноструктурами, а саме нанотрубками, оксидом графену.

**Достовірність** результатів експериментальних досліджень структури полімера при зовнішніх навантаженнях підтверджується даними квантово-хімічних досліджень, дані середньоквадратичних відхилень та параметру орієнтаційного порядку для кристалічних твердих азотів узгоджується з даними теоретичних робіт.

**Публікації та апробація.** Основні наукові результати дисертаційної роботи представлено в 4 статтях у науковому журналі «Фізика низьких температур», що

індексується наукометричними базами даних Scopus та Web of Science, та в 5 доповідях на міжнародних наукових конференціях.

До тексту роботи є низка **зауважень**.

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 0.01 Å 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.

**Загальний висновок.** Не зважаючи на зауваження, вважаю, що дисертаційна робота «Особливості структури твердих молекулярних сполук.

Азот  $^{14}\text{N}_2$  і  $^{15}\text{N}_2$  та полімери», в якій висвітлені особливості структури молекулярних речовин кристалічної та аморфної природи, повністю 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 № 341, 502, 507, а здобувачка ГУРОВА Діана Євгеніївна заслуговує на присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 -«Фізика та астрономія», в галузі знань 10 - «Природничі науки».

Опонент:

Головний науковий співробітник  
відділу фізики біологічних систем

Інституту фізики НАН України,  
доктор фізико-математичних наук, професор

Галина ДОВБЕШКО

Підпис головного наукового співробітника Інституту фізики НАН України  
Довбешко Г.І. засвідчую.

Вчений секретар

Інституту фізики НАН України,

кандидат фіз.-мат. наук



Віктор МАНЖАРА