

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ФТИ 34.01.01.25

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе

Российской академии наук

по диссертации

НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 25.06.2026 № 8

О присуждении Гурьевой Светлане Анатольевне
гражданке Российской Федерации,
ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «ИК-Фурье спектроскопия метастабильных состояний при фазовых переходах в длинноцепочечных молекулярных кристаллах» по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния» принята к защите 17 апреля 2026 г., протокол № 4, диссертационным советом ФТИ 34.01.01.25 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе), расположенном по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26. Состав диссертационного совета утвержден в количестве 17 человек приказом директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе № 02.01-02-153, прил. 1 от 15 июля 2025 г.

Соискатель Гурьева Светлана Анатольевна, дата рождения – 6 декабря 1996 г., в 2021 году окончила с отличием программу магистратуры СПбПУ по направлению подготовки – 03.04.02 «физика».

В 2025 году окончила аспирантуру в ФТИ им. А.Ф. Иоффе, в процессе обучения сданы кандидатские экзамены по физике конденсированного состояния, истории и философии науки, иностранному языку (английскому).

В период подготовки диссертации работала в лаборатории физики прочности ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

В настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника этой же лаборатории.

Диссертация выполнена в ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Научный руководитель:

Марихин Вячеслав Александрович, доктор физ. – мат. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики прочности ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Оппоненты:

Бронников Сергей Васильевич, доктор физ. – мат. наук, профессор, советник директора, зав. лаб. физической химии полимеров, Филиал НИЦ

"Курчатовский институт" - ПИЯФ - ИВС предоставил положительный отзыв на диссертацию, содержащий 3 замечания.

Заморянская Мария Владимировна, доктор физ. – мат. наук, главный научный сотрудник, зав. лаб. диффузии и дефектообразования в полупроводниках, ФТИ им. А.Ф. Иоффе предоставила положительный отзыв на диссертацию, содержащий 3 замечания.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ) предоставила положительный отзыв на диссертацию, содержащий 4 замечания.

Отзыв подписали доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, профессор, заведующий кафедрой молекулярной биофизики и физики полимеров СПбГУ Цветков Николай Викторович и доктор физико-математических наук, профессор этой же кафедры Кононов Алексей Игоревич.

Отзыв утвердил проректор по научной работе СПбГУ Микушев Сергей Владимирович.

Диссертационная работа обсуждена на заседании кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров СПбГУ 1 июня 2026 г, протокол № 44/12/4-02-4.

В заключении отзыва сказано:

Несмотря на сделанные замечания диссертация представляет собой самостоятельное и законченное исследование, содержащее новые результаты в области физики фазовых переходов, в частности, полиморфных превращений длинноцепочечных молекулярных кристаллов. Автореферат полностью отражает содержание диссертации, защищаемые положения и выводы.

Диссертационная работа Гурьевой Светланы Анатольевны «ИК-Фурье спектроскопия метастабильных состояний при фазовых переходах в длинноцепочечных молекулярных кристаллах» отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния» согласно Положению о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, а ее автор, Гурьева Светлана Анатольевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что оба оппонента имеют ученую степень доктора наук, работают в различных организациях, не имеют других ограничений, накладываемых п. 3.7 действующего Положения о присуждении ученых степеней. Выбранные оппоненты являются широко известными специалистами и обладают

высоким уровнем компетентности в научной области, в которой выполнена диссертационная работа, что подтверждается их публикациями в рецензируемых научных журналах.

Выбор ведущей организации обосновывается тем, что СПбГУ ведет активные исследования в области естественных наук, в частности в области физики полимеров. Кроме того, в СПбГУ действуют диссертационные советы по физико-математическим наукам.

Основное содержание диссертации представлено в 12 работах, опубликованных в журналах, соответствующих требованиям Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

1. Марихин В. А. Исследование кинетики фазового перехода I рода в тетракозане C₂₄H₅₀ методом ИК-Фурье спектроскопии / В. А. Марихин, С. А. Гурьева, Л. П. Мясникова, Б. З. Волчек, Д. А. Медведева // ФТТ — 2019. — Т. 61, № 10. — С. 1831 – 1835.

2. Gureva S. A. The effect of the n-alkane evenness on structural phase transitions / S. A. Gureva, V. A. Marikhin, L. P. Myasnikova, B. Z. Volchek, D. A. Medvedeva // J. Phys. Conf. Ser. — 2020. — Vol. 1697. — 012093.

3. Gureva S. A. The influence of conformational defects on the development of structural phase transition in tetracosane C₂₄H₅₀ / S. A. Gureva, V. A. Marikhin, L. P. Myasnikova, B. Z. Volchek, D. A. Medvedeva // J. Phys. Conf. Ser. — 2021. — Vol. 2103. — 012091.

4. Марихин В. А. Специфика трансформации концевых метильных групп в межламеллярных областях тетракозана при твердофазном переходе по данным ИК-Фурье-спектроскопии / В. А. Марихин, С. А. Гурьева, Е. Н. Власова // ФТТ — 2022. — Т. 64, № 12. — С. 2040 – 2048.

5. Гурьева С. А. Анализ молекулярной структуры и упаковки концевых групп n-алканов разной чётности / С. А. Гурьева, А. К. Борисов, В. А. Марихин // ФТТ — 2023. — Т. 65, № 12. — С. 2092 – 2095.

6. Гурьева С. А. Специфика полиморфизма n-алканов при температурных фазовых переходах / С. А. Гурьева, В. А. Марихин, Е. Н. Власова // ФТТ — 2023. — Т. 65, № 12. — С. 2286 – 2294.

7. Gureva S. A. Conformational disorder and its effect on structural phase transitions in tricosane C₂₃H₄₈ / S. A. Gureva, V. A. Marikhin, E. N. Vlasova // St. Petersburg. State. Polytech. Univ. J. Phys. Math. — 2023. — Vol. 16, N 1.1. — P. 84 – 89.

8. Гурьева С. А. Влияние нарушения конформационного порядка на развитие твердофазных переходов в тетракозане / С. А. Гурьева, В. А. Марихин, Е. Н. Власова // ФТТ — 2024. — Т. 66, № 9. — С. 1562 – 1576.

9. Гурьева С. А. Особенности полиморфизма н-алканов при температурных фазовых переходах / С. А. Гурьева, В. А. Марихин, Е. Н. Власова // Известия КБГУ — 2024. — Т. 14, № 1 — С. 5 – 10.

10. Гурьева С. А. Кинетика полиморфных превращений трикозана $C_{23}H_{48}$ при нагревании / С. А. Гурьева, А. К. Борисов, В. А. Марихин, М. В. Байдакова, Е. С. Куликова, П. В. Дороватовский // ФТТ — 2025. — Т. 67, № 4. — С. 711 – 723.

11. Гурьева С. А. Конформационная чувствительность прогрессий полос поглощения трикозана к полиморфным превращениям / С. А. Гурьева, В. А. Марихин, А. К. Борисов, Е. Н. Власова // ФТТ — 2025. — Т. 67, № 10 — С. 1960 – 1971.

12. Гурьева С. А. Анализ прогрессий полос поглощения в длинноцепочечных н-алканах / С. А. Гурьева, В. А. Марихин, А. К. Борисов, Е. Н. Власова // ФТТ — 2025. — Т. 67, № 11 — С. 2165 – 2172. Лично диссертантом проводились анализ результатов ИКС и подготовка публикации.

На автореферат поступило 5 отзывов.

1. Отзыв Пахомова Павла Михайловича, доктора химических наук, заведующего кафедрой физической химии ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» положительный, содержит 1 замечание:

- В работе исследуются фазовые переходы в твердых н-алканах нечетном $C_{23}H_{48}$ и четном $C_{24}H_{50}$ и это правильно (нечет-чет). Однако почему выбрана именно такая длина цепи, а не меньшая, например, ряд жидких парафинов от пентана C_5H_{12} до гексадекана $C_{16}H_{34}$ или, наоборот, большая длина твердых парафинов? Путем понижения температуры легко закристаллизовать жидкие парафины и проанализировать этот обратный фазовый переход, как это было выполнено мною еще в 1975 году (Высокомолекулярные соединения, 1975, Т.17А, №11, с.2612-2615), правда, для других целей.

2. Отзыв Кособукина Владимира Артемовича, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника ФТИ им. А.Ф. Иоффе положительный, содержит 2 замечания:

- К подробному описанию полиморфных преобразований в тексте было бы полезно добавить графическую схему ламеллярной структуры (по аналогии с известной схемой аморфно-кристаллической структуры полимеров).
- Неясно, каковы возможные причины обнаруженного увеличения с температурой частот валентных колебаний С-Н связей (рис. 3 и 4).

3. Отзыв Патлажана Станислава Абрамовича, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника ФГБУН Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н.

Семёнова Российской академии наук положительный, содержит 2 замечания:

- В работе идентификация отдельных ротационных фаз и последовательности полиморфных превращений выполнена преимущественно на основании данных ИК-Фурье спектроскопии. Представляется целесообразным более подробно обсудить соответствие предложенной интерпретации переходных фазовых состояний с результатами независимых структурных методов исследования, прежде всего рентгеновской дифракции.
- Автор связывает особенности кинетики фазовых превращений с различием чётности числа атомов углерода в молекуле. Такое объяснение представляется физически обоснованным, однако было бы полезно обсудить вопрос о том, насколько выявленные закономерности являются универсальными для всего ряда длинноцепочечных *n*-алканов. Поскольку в работе исследованы два соседних гомолога, вопрос о масштабируемости полученных результатов на более широкий класс соединений остаётся открытым.

4. Отзыв Ивановой Елены Михайловны, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Филиала федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Института высокомолекулярных соединений положительный, содержит 1 замечание:

- желательно, чтобы все надписи на представленных в автореферате графиках были сделаны на русском языке, также как и в основном тексте.

5. Отзыв Цобокалло Екатерины Сергеевны, доктора технических наук, заведующего кафедрой инженерного материаловедения и метрологии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна» положительный, содержит 1 замечание:

- В тексте автореферата следовало более подробно указать некоторые характеристики объектов исследования – *n*-алканов: фирме производителя, способе получения, молекулярном весе, длине цепей в кристаллах.

Диссертационный совет отмечает, что в рамках выполненных соискателем работ по исследованию полиморфных превращений в длинноцепочечных молекулярных кристаллах методом ИК-Фурье спектроскопии были получены следующие основные результаты:

1) Детальный анализ температурных изменений ИК спектров длинноцепочечных гомологов *n*-алканов ($C_{23}H_{48}$ и $C_{24}H_{50}$) позволил впервые выявить кинетику полиморфных превращений в *n*-алканах. В исследуемых *n*-алканах вне зависимости от их чётности и исходной

симметрии кристаллов установлена общая многоступенчатая последовательность фазовых состояний при нагревании от полностью упорядоченного твёрдого состояния до жидкого. Для чётного n -алкана $C_{24}H_{50}$ впервые выявлена полная последовательность твёрдых фаз в процессе нагревания благодаря методике проведения ИКС-эксперимента.

2) Для исследуемых n -алканов различия в кинетике фазовых превращений связаны с метастабильным развитием одной из ротационных фаз (R_V или R_I), что вызвано строением исходной низкотемпературной модификации гомологов (орторомбической или триклинной симметрии).

3) Впервые обнаружены изменения частот валентных колебаний C – H связей как в CH_2 группах в кристаллических сердцевинах ламелей, так и в концевых CH_3 группах на поверхностях ламелей при температурах, соответствующих полиморфным превращениям n -алканов.

4) Развитие твердофазных переходов в n -алканах изучено в двух структурных составляющих – в кристаллических сердцевинах ламелей, содержащих CH_2 транс-последовательности, и в межламеллярных прослойках, образованных ван-дер-ваальсовыми контактами концевых CH_3 групп молекул в соседних ламелях. Более того, обнаружены различия в очагах генерации структурных перестроений в n -алканах разной чётности при нагревании.

5) Установлено, что термическая активация конформационных дефектов различных типов происходит скачкообразно при каждом переходе в промежуточную фазу. Обнаружено, что наибольшие концентрации дефектов достигаются именно в гексагональной фазе R_{II} , для которой характерна высокая подвижность молекул в ламелях. Сделан вывод о том, что даже незначительное увеличение концентрации конформационных дефектов различного типа при нагревании n -алканов способствует структурным перестроениям при последовательных полиморфных превращениях.

6) На основании всех проведённых исследований предположен механизм структурных перестроений n -алканов при нагревании, связывающий локальные структурные трансформации, происходящие на молекулярном уровне, и полиморфные превращения.

Все научные результаты являются новыми и имеют фундаментальную и практическую значимость. Выявленная кинетика полиморфных превращений в длинноцепочечных n -алканах разной чётности позволила установить более строгие корреляции между структурой и закономерностями фазовых переходов, в том числе выявить структурные изменения молекул, способствующие перестроениям всего кристалла. Предположенный механизм структурных перестроений n -алканов при нагревании, связывающий локальные структурные трансформации,

происходящие на молекулярном уровне, и полиморфные превращения позволил заполнить имеющиеся в литературе пробелы и разрешить ряд противоречий относительно перестроения одних ротационных фаз в другие при нагревании длинноцепочечных n -алканов. Практическая значимость работы заключается в важности полученных результатов для обеспечения фундаментальной основы применения n -алканов в качестве материалов с изменяемым фазовым состоянием (PCM-материалов), повышения эффективности их использования и внедрения в повседневную жизнь человека (строительство, текстильная промышленность “smart textile”, хранение и транспортировка био-продуктов и др.).

Высокая степень достоверности результатов обеспечивается их согласием с представлениями о полиморфных превращениях в длинноцепочечных молекулярных кристаллах, изложенными в различных литературных источниках. Достоверность полученных результатов также подтверждается применением современных экспериментальных методов и воспроизводимостью на аналогичных образцах и установках.

Обоснованность сформулированных выводов подтверждается использованием разработанных методов обработки ИК спектров, позволяющих с высокой точностью анализировать температурные изменения полос поглощения, а также сопоставлением получаемых данных с расчётными и экспериментальными результатами, известными в литературе.

Полученные результаты позволили соискателю сформулировать и защитить следующие положения:

- 1) В монодисперсных n -алканах $C_{23}H_{48}$ и $C_{24}H_{50}$ с различной исходной кристаллической симметрией (орторомбической/триклинной) наблюдается общая последовательность фазовых переходов при нагревании: кристалл $\rightarrow$ моноклинная ротационная R_V фаза $\rightarrow$ орторомбическая ротационная R_I фаза $\rightarrow$ ромбоэдрическая (гексагональная) ротационная R_{II} фаза $\rightarrow$ жидкость.
- 2) Появление метастабильных состояний обуславливает различие кинетики развития полиморфных превращений при нагревании n -алканов разной чётности ($C_{23}H_{48}$ и $C_{24}H_{50}$). Для $C_{23}H_{48}$ метастабильно развивается фаза R_V , при этом фаза R_I является стабильной, тогда как для $C_{24}H_{50}$, наоборот, фаза R_V стабильна, а фаза R_I метастабильна.
- 3) Эффект чётности числа атомов углерода в молекулах n -алканов приводит к различию в очагах генерации структурных перестроений. В нечётном n -алкане $C_{23}H_{48}$ начальные перестроения структуры возникают в межламеллярном пространстве, содержащем концевые CH_3 и ближайшие к ним CH_2 группы. В чётном n -алкане $C_{24}H_{50}$ твердофазный переход зарождается в сердцевинах ламелей.

4) Появление конформационных дефектов типа концевых гош-дефектов gt_m и кинков gtg^* при нагревании исследуемых n -алканов обуславливает перестроение одной ротационно-кристаллической фазы в другую при твердофазных переходах.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в проведении ИК-спектроскопических исследований, включая подготовку образцов, запись ИК-Фурье спектров, контроль и управление температурными режимами. Обработка полученных ИК-Фурье спектров проводилась лично соискателем на основании разработанной методики декомпозиции налагающихся полос поглощения, учитывающей коррекцию базовой линии, выбор физически обоснованной функции для аппроксимации формы полос поглощения и согласие с физической моделью молекулярных колебаний.

Защищаемые результаты диссертационной работы получены соискателем лично. Вклад автора в анализ полученных экспериментальных результатов, их интерпретацию, а также в написание статей является определяющим.

Автор принимал активное участие в подготовке докладов по результатам работы и лично представлял их на научных конференциях и семинарах.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 15 докторов наук по специальности 1.3.8 - «физика конденсированного состояния», участвовавших в заседании, из 17 человек, входящих в состав совета, проголосовали за – 15, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

На заседании 25 июня 2026 года диссертационный совет принял решение присудить Гурьевой Светлане Анатольевне ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния».

Председатель

диссертационного совета

доктор физ.-мат. наук

Ю.Г. Кусраев

Ученый секретарь

диссертационного совета

доктор физ.-мат. наук

М.А. Семина

25 июня 2026 г.