Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U004089

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-10-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кизима Олена Анатоліївна

2. Kyzyma Olena Anatolijivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 30-09-2008

Спеціальність за освітою: 8.070101

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.08

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.17.19

Тема дисертації:

1. Динаміка утворення кластерів фулеренів С60 в полярних розчинниках

2. Dynamics of fullerene C60 cluster formation in the polar solvents

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню процесів формування кластерів в рідинних системах фулеренів на основі полярних розчинників згідно даних з малокутового розсіяннґ нейтронів (МКРН), мас-спектрометрії та спектрофотометрії. Головна увага приділяється дослідженню впливу додавання води в систему С60-N-метил-2-пірролідон (NMP) на структурні особливості кластерів фулеренів та вивченню стабілізації кластерів С60 в полярних розчинах. На основі даних МКРН встановлено, що при розбавленні системи С60-NMP водою відбувається перебудова кластерів фулеренів та з'являються агрегати з характерними розмірами в діапазоні (10-100) нм. Виявлено, що ефект перебудови кластерів фулеренів має пороговий характер: різке збільшення частини малих кластерів в розчині спостерігається коли вода складає >40% за об'ємом. Виявлено вплив віку системи С60-NMP на структуру кластерів в системі С60-NMP-H2O. Показано, що чим старший початковий розчин С60-NMP, тим більші кластери утворюються при додаванні води. Виявлено явище

сольватохромізму,що спостерігається через місяць після приготування системи C60-NMP (повільний сольватохромний ефект), а також після розбавлення системи водою. Проведене моделювання оптичного спектру показало, що внесок розсіяння від великих агрегатів в оптичний спектр поглинання системи C60-NMP незначний і явище повільного сольватохромного ефекту пов'язано зі зміною електронного стану молекул фулеренів, яке, скоріш за все, викликане формуванням донорно-акцептроних комплексів фулерен-NMP. Результати дослідження впливу додавання води в систему C60-NMP методами малокутового розсіяння нейтронів, мас-спектроскопії та спектрофотометрії показали, що перебудова кластерів фулеренів при розбавленні системи відбувається за рахунок відщеплення мономерів. Дослідження коагуляції рідинної системи вода-фулерен показали, що система C60-H2O характеризується високою стабільністю кластерів фулеренів за рахунок формування молекулами води щільної сольватної оболонки навколо кластерів.

2. The thesis concerns the research of cluster formation in a liquid system of fullerenes based on polar solvents as observed by small-angle neutron scattering (SANS), mass-spectroscopy and UV-Vis spectroscopy. The main attention is paid to investigation of influence of water addition in the C60-N-methyl-2-pyrrolidone (C60-NMP) system on the structure of fullerene clusters and research of the stabilization mechanism of fullerene cluster in polar solution. Absorption spectra were obtained using Shimadzu UV-2401PC and Hitachi U-2000 UV/Vis spectrophotometers. Laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry was used for ion production. Measurements were conducted using the Bruker Daltonics Autoflex II instrument. SANS experiments were performed on the small-angle diffractometers at the IBR-2 pulsed reactor of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, and at the research steady-state reactor of the Budapest Neutron Centre, Hungary. The effect of cluster reorganization in the systemC60-NMP after addition of water was observed by small-angle neutron scattering and mass spectroscopy. Results of the SANS experiments indicate that large stable clusters in the C60-NMP solution are partially dissociate into smaller ones with the addition of water. The effect has a sharp character when the water content in the system approaches 40 vol. %. This effect depends on the time interval between preparation of C60-NMP solution and its dilution with water: the size of the clusters formed in the final C60-NMP-H2O solution increases with the age of initial C60-NMP solution. A change in UV-Vis spectrum with time (temporal solvatochromic effect) within one month after preparation of the C60-NMP system and sharp solvatochromic effect after water addition to the fresh C60-NMP system were observed. When water was added into the system C60-NMP, solvatochromic effect took place depending on the time interval between the preparation of the initial C60-NMP solution and the addition of water. The most pronounced changes in the UV-Vis spectrum took place if water was added to the fresh C60-NMP solution. The growth of scattering particles in the C60-NMP system leads to an increase in the Mie scattering contribution into the absorption spectrum. Estimation of the Mie scattering contribution into the UV-Vis spectrum was performed. The results of the calculations showed that the Mie scattering contributes insignificantly to the UV-Vis spectrum. Therefore the changes in the UV-Vis spectrum are due to absorption, which relates to electronic state of fullerene molecules. The mass-spectroscopy investigations of the C60-NMP system are showed that fullerenes form large scale clusters with strong bonds between molecules with time. The addition of water in this system leads to the decomposition of fullerene clusters in the solutions. It should be noted that dilution of the old (age more than 1 month) C60-NMP system results in appearing of monomer peak whereas small fullerene clusters (up to 13 monomers in the cluster) were not observed. This fact indicates that the decomposition of clusters in the solutions occurs as a result of the monomer detachment. The investigation of the coagulation process in the liquid system water-fullerene C60 revealed strength stabilizing water shell, which is formed on the surface of the fullerene clusters.

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. Булавін Леонід Анатолійович
2. Bulavin Leonid Anatoliyovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Клепко Валерій Володимрович
2. Клепко Валерій Володимрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.19

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стржемечний Михайло Олексійович

2. Стржемечний Михайло Олексійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради — Єжов Станіслав Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Єжов Станіслав Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності — Юрченко Т.А.