Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0403U002719

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-07-2003

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Безродна Тамара Володимирівна

2. Bezrodna Tamara Volodymirivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.05

Назва наукової спеціальності: Оптика, лазерна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 01-07-2003

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.159.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29.25, 29.31.21

Тема дисертації:

1. Спектроскопічні дослідження особливостей структури та міжмолекулярних взаємодій в гетерогенних наносистемах на основі діоксиду титану

2. Spectroscopic investigations of structure and molecular interactions peculiarities in heterogeneous nanosystems based on titanium dioxide.

Реферат/анотація:

1. У дисертації досліджено механізми взаємодії органічних полярних молекул з частинками TiO2 в залежності від кристалічної структури (анатаз, рутил), термообробки TiO2 та модифікації поверхні TiO2 перехідними металами (Cu, Mn, Cr, Co, Ni, Fe). Визначено стехіометричне відношення O/Ti (~2) та розміри нанокристалітів (~ 5-15 нм) полідисперсних зразків TiO2. Встановлено, що основними активними центрами поверхні анатазу є центри типу Бренстеда та Льюїса, тоді як на поверхні рутилу присутні тільки льюїсівські. Проаналізовано гідратне покриття поверхні частинок TiO2. Встановлено, що молекули нітробензолу взаємодіють з поверхнею TiO2 слабкими ван-дер-ваальсовими силами. Виявлено, що у гетерогенних системах рідкого кристала 5CB з полідисперсним TiO2 утворюються слабкі водневі зв'язки типу -CN...HO-Ti. Встановлена одночасна присутність стабільної кристалічної ?- та аморфної ?-модифікації бензофенону в усіх досліджених гетерогенних системах з частинками TiO2. Молекули бензофенону утворюють порівняно

сильні водневі зв'язки з гідроксильними групами поверхні TiO2 через CO-групу, а також координаційні зв'язки із льюїсівськими центрами поверхні TiO2. Продемонстровано, що взаємодія різних полярних органічних молекул з полідисперсним TiO2 може бути ефективним методом визначення типу та концентрації різних активних центрів на його поверхні

2. The thesis is devoted to the investigations of interaction mechanisms between organic polar molecules and TiO2 particles depending on TiO2 crystalline structure (anatase, rutile), thermal treatment and its surface modification by different transition metals (Cu, Mn, Cr, Co, Ni, Fe). The stochiometric composition O/Ti (~ 2) and nanocrystals sizes (~ 5-15 nm) of TiO2 polydisperse samples have been determined. The main anatase surface active centers have been found out to be Brensted and Lewis acids, while in the case of rutile there are only Lewis ones. The hydrate covering of TiO2 particle surface is formed by adsorbed water molecules, interacting with the hydroxyls of TiO2 surface by relatively weak (~ 5 kcal/mol) and strong (~ 7 kcal/mol) hydrogen bonds. Nitrobenzene molecules interact with TiO2 surface by means of weak Van-der-Vaals forces. It has been found out that weak hydrogen bonds of -CN...HO-Ti type form in heterogeneous systems based on 5CB liquid crystal and polydisperse TiO2. Metal cations, being adsorbed on TiO2 surface have a polarizing effect on 5CB molecules, according to values of their polarizing potentials. In all studied heterogeneous systems with benzophenone the last one exists simultaneously in its stable ?-crystal and ?-amorphous. Benzophenone molecules form relatively strong hydrogen bonds with the hydroxyls of TiO2 surface via their CO groups and also coordination ones with Lewis centers on the TiO2 surface. Molecular interactions of different polar organic molecules with polydisperse TiO2 have been shown to be an efficient method for the characterization of different active centers on the TiO2 surface

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. Пучковська Галина Олександрівна

2. Puchkovska Galina Alexandrovna

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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. Погорелов Валерій Євгенович
2. Погорелов Валерій Євгенович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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. Данчук Віктор Дмитрович
2. Данчук Віктор Дмитрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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	Бродин Михайло Семенович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Бродин Михайло Семенович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.