Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0415U000940

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-04-2015

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Баришніков Гліб Володимирович
2. Baryshnikov Glib Volodymyrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-03-2015

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

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 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Структурні та спектральні властивості гетероциркуленів і сенсибілізуючих барвників для фотоелектричних перетворювачів

2. Structural and spectral properties of heterocirculenes and sensitizing dyes for photovoltaic cells

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню електронної будови та спектральних властивостей гетероциркуленів, органічних та металокомплексних фотосенсибілізуючих барвників у контексті їх застосування у світловипромінюючих пристроях та сонячних елементах Гретцеля. У роботі показано, що висока симетрія гетероциркуленів накладає обмеження на їх люмінесцентні властивості, на основі чого було синтезовано новий клас гетероциркуленів - азаоксо[8]циркулени та охарактеризовано їх структурні та спектральні властивості. Особливу увагу у роботі приділено ароматичним властивостям гетероциркуленів як перших представників плоских антиароматичних циклооктатетраенів. На основі квантово-хімічних досліджень кристалічної структури гетероциркуленів показано, що сильні міжмолекулярні взаємодії обумовлюють їх здатність до формування міцних стекінг-димерів, що викликає помітні збурення електронних оболонок сусідніх молекул. Окрема увага у дисертаційній роботі приділена початковому

механізму генерації електричного струму у сонячних елементах Гретцеля. Зокрема показано, що основною вимогою до фотосенсибілізуючих барвників є здатність першого збудженого стану до електронної інжекції в зону провідності напівпровідника. При цьому можливі два шляхи заселення цього стану: 1) прямий, за рахунок інтенсивного S0-S1 поглинання з перенесенням заряду; 2) опосередковано із залученням вищих збуджених станів за схемою S0-Sn-S1. Встановлено, що конформація молекули фотосенсибілізатора є важливим фактором, який визначає ефективність перенесення та розділення зарядів при фотозбудженні, важливу роль у чому відіграють численні невалентні взаємодії, вперше охарактеризовані у дисертаційній роботі для досліджених органічних барвників.

2. The thesis is devoted to investigation of the electronic structure and spectral properties of the heterocirculenes, organic and organometallic photosensitizing dyes as being a material for the light-emitting devises and the Gratzel-type solar cells. It is shown in the thesis, that the high symmetry of the heterocirculene molecules imposes the restriction on the electroluminescence properties. On this basis a new azaoxo[8]circulene species were synthesized and their structural and spectral properties were studied for the first time. The particular attention is paid to the aromatic properties of heterocirculene species as the first representatives of the planar antiaromatic cyclooctatetraenes. On the ground of the quantum-chemical study for the heterocirculenes crystal structure it is shown that the strong intermolecular interactions cause the formation of the stable stacking dimers. This provides an appreciable perturbation of the electronic shells for the neighboring molecules. The special attention in the thesis is paid to the initial mechanism of the electric current generation in the Gratzel-type solar cells. Particularly, it is shown that the first exited state of the photosensitizing dye must be able for electron injection into the TiO2 conduction band. In this context, two different mechanisms of the first exited state occupation can be realized: 1) direct mechanism due to intense S0-S1 absorption; 2) indirect mechanism S0-Sn-S1 through the higher exited state levels. It is stressed in the thesis that the conformation of the photosensitizing dye molecule is an important factor which is determined charge transfer and charge separation efficiency. In this connection the numerous non-covalent interactions are important to be taken into account, which is shown in the thesis for the first time.

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. Мінаєв Борис Пилипович
2. Minaev Boris Filippovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Іщенко Олександр Олександрович
2. Іщенко Олександр Олександрович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

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. Іванов Володимир Венедиктович
2. Іванов Володимир Венедиктович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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

