Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U101425

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-10-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сєтов Євген Анатолійович

2. Syetov Yevgen Anatoliiovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.07

Назва наукової спеціальності: Фізика твердого тіла

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 02-10-2020

Спеціальність за освітою: Фізика твердого тіла

Місце роботи здобувача: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

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 08.051.02

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, 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: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Коливальні спектри та люмінесцентні властивості фотореактивних систем у твердому фазовому стані

2. Vibrational spectra and luminescent properties of photoreactive systems in the solid state

Реферат/анотація:

1. Об’єкт – енергетичний спектр фотореактивних молекулярних кристалів з перенесенням протона. Мета – виявлення закономірностей впливу міжмолекулярної взаємодії та розупорядкованості кристалічної структури на електронні та коливальні енергетичні стани бензоксазолів із внутрішньомолекулярним фотоперенесенням протона. Методи – флуоресцентна спектроскопія, лазерна спектроскопія комбінаційного розсіяння світла, інфрачервона спектроскопія, теоретичні розрахунки на основі теорії функціоналу густини, нестаціонарної теорії густини, теорії функціоналу густини в наближенні сильного зв’язку та методу атом-атомних потенціалів. Показано, що міжмолекулярна взаємодія обумовлює виникнення решіткових коливань із частотами в діапазоні до 150 см^{-1}, у той же час як внутрішні коливання кристалів відповідають

молекулярним коливанням енольних структур із внутрішньмолекулярними водневими зв'язками між атомами оксигену та нітрогену. Встановлено, що люмінесценція кристалічних сполук 2,5-ді-(2-бензоксазоліл)фенол та 2,5-біс(2-бензоксазоліл)гідрохінон обумовлена переходами між станами, які відповідають як енольній, так і кето-структурам молекул, а сполуки 2-(2'-гідроксифеніл)бензоксазол – лише переходами між станами, які утворюються при формуванні кето-структури молекули. Теоретично показано, що обмеження внутрішнього обертання в кето-структурах молекул бензоксазолів перешкоджає безвипромінювальним переходам з першого збудженого стану до основного. Сфера використання – розробка органічних елементів оптоелектроніки.

2. The object is energy spectrum of photoreactive molecular crystals with proton transfer. The aim of the study is ascertainment of effects of intermolecular interaction and crystal structure disorder on the electronic and vibrational states of benzoxazoles undergoing excited state intramolecular photon transfer. Methods – fluorescence spectroscopy, Raman spectroscopy, infrared spectroscopy, theoretical modeling with the use of density functional theory, time-dependent density functional theory, density-functional based tight-binding and atom-atom potential methods. It is shown that intermolecular interaction causes lattice vibrations with frequencies in the range below 150 cm^{-1}, while the internal vibrations of crystals correspond to the molecular vibrations of enol structures with intramolecular hydrogen bonds between oxygen and nitrogen atoms. It is found that luminescence of crystalline compounds 2,5-di-(2-benzoxazolyl)phenol and 2,5-bis(2-benzoxazolyl)hydroquinone is caused by transitions between the states corresponding to both enol and keto structures of the molecules, in case of compound 2-(2□-hydroxyphenyl)benzoxazole – only by transitions between states corresponding to the keto. It is theoretically shown that restriction of internal rotation in the keto structures of the benzoxazole molecules inhibits the radiationless transitions from the first excited to ground state. Application field – design of organic components for optoelectronics.

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. Моісеєнко Василь Миколайович

2. Moiseienko Vasyl Mykolajovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Стефанович Леонід Ілліч
2. Stefanovich Leonid I.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Філоненко Наталія Юріївна
2. Filonenko Nataliia Yurievna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.07

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 Скалозуб Володимир Васильович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Скалозуб Володимир Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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