

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U001665

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-04-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хаврюченко Олексій Володимирович

2. Khavryuchenko Oleksiy Volodymyrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.01

Назва наукової спеціальності: Неорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 17-04-2006

Спеціальність за освітою: 01.08

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):** Д26.001.03

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**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:** 31.17.15

**Тема дисертації:**

1. Фулеренвмісні композити високодисперсних матеріалів на основі сполук силіцію з люмінесцентними властивостями
2. Composites of fullerene and highly dispersed silica with luminescent properties

**Реферат:**

1. Синтезовано композити фулерену С<sub>60</sub> та колоїдних водних розчинів фулерену з високодисперсними матеріалами на основі сполук силіцію: полігідридсилоксаном, монооксидом силіцію, аеросилом та аеросилом, модифікованим вуглеводневими радикалами. Вперше отримано аеросили, модифіковані ненасиченими вуглеводневими радикалами, шляхом високотемпературної обробки у вакуумі (карбонізації) зразків, модифікованих аліфатичними групами. Наявність та форму існування фулерену на поверхні носіїв встановлено за допомогою мас-спектрометрії, спектрів дифузного відбиття та ІЧ спектроскопії. Механізм сорбції фулерену на кластерах монооксиду силіцію, дегідроксильованих ділянках поверхні аеросилу та карбонізованих зразках модифікованого аеросилу було встановлено шляхом комплексного спектрального та квантовохімічного дослідження. Методом диференційної термогравіметрії оцінено концентрації вуглецевої складової композитів. Встановлено залежність сорбційної здатності радикалів прищепленого шару від

довжини вуглеводневого ланцюга та наявності ненасичених зв'язків карбон-карбон. Досліджено спектри фотолюмінесценції синтезованих композитів.

2. Ten new composites of C60 fullerene and colloid water solution of the fullerene with highly dispersed silica: polyhydridesiloxane, silicon monoxide, fumed silica and fumed silica modified with hydrocarbon radicals - have been synthesised. The fumed silica, modified with unsaturated hydrocarbon radicals, has been firstly prepared by a high temperature treatment in the vacuum (carbonization) of samples, modified with aliphatic groups. The presence and the form of the fullerene on the surfaces of the supports have been determined by mass-spectrometry, diffusion reflectance and transmission Fourier transformation infrared spectroscopy. The concentrations of the carbonic component of the composites have been estimated by the differential thermogravimetry. The spectroscopic and quantum chemical examination of the commercial powder and synthesized film of silicon monoxide give an evidence to the existence of the silicon clusters, surrounded by the intermediate SiO<sub>x</sub> layer inside the SiO bulk. It has been shown that the sorption of the fullerene on the surface of the silicon monoxide and polyhydridesiloxane is reversible and does not lead to the formation of stable composites, contrary to the sorption on the surface of modified fumed silica. The efficiency of the fullerene sorption on the fumed silica, modified with alkyl groups, increases upon the growth of the grafted chain length. The composites of the C60 with the silica, modified with saturated hydrocarbon radicals, contain the admixtures of the fullerene oxide C60O and, sometimes, the dimer of the partially destroyed fullerene C112. The mechanisms of the fullerene sorption on the silicon monoxide clusters, on the dehydroxylated areas of the fumed silica surface and on the carbonized samples of the modified fumed silica have been ascertained by the complex spectral and quantum chemical study. The formation of the covalent bonds between fullerene and the groups of the dehydroxylated area of the fumed silica has been shown. A formation of the covalent bond between the fullerene and dehydrogenized alkyl radicals, grafted on the fumed silica surface, has been observed. It has been shown that the intensity of the valent vibration of the conjugated C=C bond in the IR spectra of the fullerene composites with the carbonized modified silica increases due to the kinematic effect. This might be used for the identification of the fullerene bonding in the composite. It has been shown that a C60-(H<sub>2</sub>O)<sub>60</sub> system is the most energetically stable clathrate formation of the fullerene and water. The water-fullerene clathrates appear to be quantitatively sorbed on the surface of the fumed silica, resulting in a composite formation, contrary to the toluene solutions. The photoluminescence of the synthesized composites has been studied. The impact of the silica surface, modified with the alkyl groups, is slight, while the emission spectra of the composites with the silica, modified by unsaturated hydrocarbon radicals, are significantly blue shifted and the intensity of the emission increases.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

### **Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Голуб Олександр Андрійович
2. Golub Alexander Andreevich

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.01, 02.00.01

**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. Калібабчук Валентина Олександрівна
2. Калібабчук Валентина Олександрівна

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.01, 02.00.01

**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. Єременко Анна Михайлівна
2. Єременко Анна Михайлівна

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.04, 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**

Слободяник Микола Семенович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Слободяник Микола Семенович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.