Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0512U000591

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-07-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобода Олександр Андрійович
2. Loboda Oleksandr Andriyovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 05-07-2012

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А. В. Думанського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417348

Місцезнаходження: 03680, Україна, Київ-142, пр. Вернадського, 42

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 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, 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 колоїдної хімії та хімії води ім. А. В. Думанського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417348

Місцезнаходження: 03680, Україна, Київ-142, пр. Вернадського, 42

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.43

Тема дисертації:

1. Квантово-хімічне дослідження електронної будови та нелінійні оптичні властивості порфіринів і фулеренових похідних.

2. Quantum-chemical investigation of electronic structure and nonlinear optical properties of porphyrins and fullerene derivatives

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота містить теоретичні дослідження електронної структури, оптичних та спектроскопічних властивостей ряду сполук, а саме - порфіринів, фулеренів та карбонових наноструктур, до яких відносяться гетероатомні одностінні нанотрубки та ін. Наріжним каменем роботи є дослідження нелінійних оптичних властивостей та встановлення впливу природи замісників на посилення нелінійних оптичних ефектів. Представлено якісно нові результати, які розв'язують проблему, що має практичне значення, а саме - теоретичне передбачення властивостей матеріалів для фотосенсибілізаторів, органічних світлодіодів та елементів сонячних батарей. Здійснено аналіз широкого набору квантово-хімічних методів, направлених на дослідження фотофізичних властивостей фулеренових та порфіринових похідних. Зокрема, в результаті проведеної роботи було встановлено причину та зв'язок між завищенням значень поляризовних

складових та електронодонорною здатністю замісника. Якісно та кількісно було оцінено електронні та коливальні внески у гіперполяризовність фулерен-хромофорних донорно-акцепторних пар. Одно- та двофотонні абсорбційні спектри функціоналізованих фулеренових похідних, які були одержані на підставі квантово-хімічних розрахунків, добре узгоджуються з експериментально добутими результатами MALDI-TOF-MS, ATR-IR, UV, NMR, Z-scan спектроскопій. Особливу увагу приділено розробці та розвитку новітніх (O)N лінійних методів для застосування в квантово-хімічній теорії електронної структури. Як було доведено дані методи не поступаються у точності розрахунків традиційним методам, при цьому значно зменшують витрати CPU часу, тому є незамінним знаряддям для дослідження електронної структури наносполук.

2. The thesis contains a theoretical study of electronic structure, optical and spectroscopic properties of a number of compounds - namely, porphyrins, fullerenes and carbon nanostructures, which include heteroatom single wall nanotubes and others. The milestone of the thesis is to study the nonlinear optical properties and disclose the influence of the nature of substitutes to enhance nonlinear optical effects. Qualitatively new results that address the issue that is of practical importance - namely, the discovery and development of materials for photosensitizers, organic LEDs and solar cells are presented. The performed analysis of a wide range of quantum-chemical methods aimed to study photophysical properties of porphyrin and fullerene derivatives. In particular, as a result of the work it was found the cause and relationship between the overshooted values of polarization components and the donor ability of the substitute. Qualitatively and quantitatively evaluated the electronic and vibrational contributions to the hyperpolarization of fullerene-chromophore donor-acceptor pairs. Single and two-photon absorption spectra of functionalized fullerene derivatives that were calculated on the basis of quantum-chemical calculations agree well with experimental results obtained by MALDI-TOF-MS, ATR-IR, UV, NMR, Z-scan spectroscopies. Particular attention is paid to the design and development of new (O)N linear methods for application in quantum-chemical theory of electronic structure. It was shown that these methods display accuracy comparable to the accuracy of traditional method calculations and greatly reduce the cost of CPU time, which make them an indispensable tool for studying the electronic structure of the nano-compounds.

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)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дмитрук Олександр Філаретович

2. Дмитрук Олександр Філаретович

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

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович

2. Лобанов Віктор Васильович

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

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 Гунько Володимир Мусійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Гунько Володимир Мусійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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