Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0511U000085

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-02-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Давидова Надія Олександрівна

2. Davydova Nadejda Aleksandrovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 27-01-2011

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: 29.19.15

Тема дисертації:

1. Структура молекулярних ароматичних стекол, твердотільні метастабільні стани і поліморфізм

2. Structure of molecular aromatic glasses, solid metastable states, and polymorphism.

Реферат/анотація:

1. В дисертації досліджено процес склоутворення переохолодженої рідини, та формування метастабільних модифікацій методами інфрачервоної і раманівської спектроскопії та диференційної скануючої калориметрії. Досліджені молекулярні сполуки: бензофенон, орто - і парабромбензофенони; 4,4-дихлорбензофенон; 2-біфенілметанол і салол. Показано, що нуклеація метастабільной фази має вирішальне значення при склоутворенні. Зародки ближнього порядку виникають у процесі охолодження рідкого стану при Тн ~ 1.2 Tg (Tg - температура склування). Флуктуаційні зародки утворюють динамічну неоднорідність у переохолодженій рідині в області температур Tg<Тн<1.2Tg. При температурі T<Tg кристалічні зародки стають суттєвими елементами структури скла. Виявлено існування поліморфізму в 2-біфенілметанолі та ортобромбензофеноні. Ріст метастабільних модифікацій спостерігається при розморожуванні склоподібних станів. Вперше отримані кристалічні структури обох поліморфів у 2-біфенілметанолі. Встановлено, що стабільна модифікація має триклінну гратку з просторовою групою симметрії P1. Особливістю кристалічної структури є наявність у ній тетрамерів молекул, утворених водневим зв?язком. Метастабільна модифікація

має моноклінну гратку з просторовою групою симметрії Pc, особливістю якої є наявність у ній ланцюжків молекул, утворених водневим зв?язком.

2. The dissertation deals with a study of vitrification of supercooled liquids and formation of the metastable phases using infrared and Raman spectroscopy and differential scanning calorimetry methods. The molecular compounds such as benzophenone, ortho- and parabromobenzophenone, 4,4'- dichlorobenzophenone, 2-biphenylmethanol, and salol were investigated. It was shown that the crystal nucleation of the metastable phase plays a crucial role in the vitrification of supercooled liquids. The crystal embryos/nuclei are generated at Tn ~ 1.2 Tg (Tg is the glass transition temperature) in the course of cooling of the supercooled liquid. These crystalline nuclei lead to dynamic heterogeneity of the supercooled liquid in the temperature interval Tg<Tn<1.2Tg. During subsequent cooling below Tg the fluctuating nuclei become an important element of the glass structure. The occurrence of polymorphism in 2-biphenylmethanol and orthobromobenzophenone was revealed. The crystal structures of two polymorphs of 2-biphenylmethanol were determined. The crystal of the stable phase was shown to be triclinic, space group P1. The molecules form intermolecular hydrogen bonds producing a tetramer local structure. The crystal of the metastable phase belongs to the monoclinic system, space group Pc. The molecules are linked by hydrogen bonds into chains.

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. Бродин Михайло Васильович
2. Brodyn Mykhailo Semenovych

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. Стржемечний Михайло Олексійович

2. Стржемечний Михайло Олексійович

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. Маломуж Микола Петрович

2. Маломуж Микола Петрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. 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

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.