

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U000787

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-03-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дорошенко Ірина Юріївна

2. Doroshenko Iryna Yurievna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 01-03-2005

Спеціальність за освітою: 0.070101

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): Д 26.001.08

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: 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: 29.17.43

Тема дисертації:

1. К-структура рідких одноатомних спиртів з даних коливальної спектроскопії
2. The V-structure of liquid monohydric alcohols from the data on vibrational spectroscopy

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена з'ясуванню особливостей структури рідких одноатомних спиртів (метанолу та етанолу), визначенню фізичних параметрів асоціатів, що утворюють цю структуру, та характеру коливальної релаксації в них. Виконано квантово-хімічне моделювання асоціатів, що утворюють структуру рідкого метанолу, розраховано їх оптимальну просторову будову, енергетичні та електричні параметри. Визначено, що структура рідкого метанолу утворена переважно циклічними тримерами та тетрамерами. Вивчено зміни в геометрії молекул метанолу, що виникають при їх об'єднанні в кластери. З'ясовано, що найбільшого впливу зазнає довжина водневого зв'язку: вона неухильно зменшується із збільшенням кількості молекул в асоціаті. Досліджено контури смуг КР у метанолі та етанолі в температурному діапазоні існування конденсованої фази (160 – 340 К). Зафіксовано стабільність К-структури рідких одноатомних спиртів в дослідженому діапазоні температур. Проведено кореляційний аналіз спектрів КР метанолу та розраховано

час коливальної релаксації. Обґрунтовано гіпотезу про те, що розширення коливальних смуг обумовлене дисоціацією водневих зв'язків між молекулами спирту.

2. The work is devoted to the determining of the structure peculiarities of liquid monohydric alcohols (methanol and ethanol), physical parameters of the clusters, which form this structure, and the character of vibrational relaxation in these alcohols. Quantum-chemical calculations of the associates forming the structure of liquid methanol were made. Their optimal space geometry, forming energy and electrical parameters were calculated. It was determined, that the structure of liquid methanol is formed mainly by cyclic trimers and tetramers. The changes in the molecule geometry of methanol, which occur at the molecular association, were studied. The Raman profiles in methanol and ethanol were investigated in the temperature region of the condensed phase existing (160 – 340 K). The dynamical stability of the structure of liquid monohydric alcohols in the investigated temperature region was registered. The correlation analysis of the Raman spectra of methyl alcohol was made. The time of vibrational relaxation was calculated. The broadening of the vibrational bands in the spectra of alcohols can be explained by the process of hydrogen bond dissociation.

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. Погорелов Валерій Євгенійович
2. Pogorelov Valeriy Yevgenjevich

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.14

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. Пучковська Галина Олександрівна
2. Пучковська Галина Олександрівна

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Охріменко Борис Андрійович
2. Охріменко Борис Андрійович

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**

Булавін Леонід Анатолійович

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

Булавін Леонід Анатолійович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.