

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U000178

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Михайленко Олексій Володимирович

2. Mykhajlenko Oleksij Volodymyrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 11-01-2005

Спеціальність за освітою: 7.070.301

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 26.001.25

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: 31.21.15

Тема дисертації:

1. Фулерени, нанотрубки і нанокільця: стереохімія та спосіб кодування (номенклатура). Комплекси фулеренів з каліксаренами
2. Fullerenes, Nanotubes and Nanorings: Stereochemistry and Encoding (Nomenclature). Complexes of Fullerenes with Calixarenes

Реферат:

1. Дисертацію присвячено дизайну та моделюванню замкнених ароматичних поверхонь: фулеренів, нанотрубок, нанокілець, комплексів фулеренів з калікс-[n]аренами, а також вивченню особливостей їх структури, процесів та явищ, які з ними відбуваються. Розроблено правила конструювання хіральних фулеренів, нанотрубок та нанокілець. Запропоновано універсальний спосіб кодування (номенклатуру) 6-нанотрубок та 6-нанокілець. Запропоновано новий механізм утворення фулеренів і нанотрубок з графіту. Складено програму для автоматичного генерування карбонових нанотрубок та нанокілець на основі розробленого способу кодування. Експериментально вивчено комплексоутворення фулеренів з похідними тіакалікс[4]арену. Розраховано константи стійкості цих комплексів і вироблено практичні рекомендації з їх

використання щодо виділення фулеренів з фулеренової сажі та їх подальшого розділення.

2. The thesis deals with designing and modelling closed aromatic surfaces - fullerenes, nanotubes and nanorings, as well as investigation of fullerene complexes with calix[n]arenes. For the first time there have been investigated and revealed stereochemical peculiarities of fullerene cap structures for carbon nanotubes. There has been suggested a method for designing chiral and non-chiral fullerenes and nanotubes which lies in connecting two end groups (fullerene caps) to non-chiral side open nanotube surfaces which results in formation of closed aromatic surfaces. In case, when connected, the caps turn relatively one another, enantiomeric forms are obtained, but if the caps do not turn, with an odd number of six-membered ring bands, meso-forms are created on the side nanotube surface. The thesis presents a new universal method describing nanotubes and nanorings, which, like graphite, consist of six-membered cycles only. The method is based on the concepts of basic link and invariant unit. To get full comprehension of the encoding method, the definitions and thorough description of basic links and invariant units have been given. A basic link is a chain of carbon atoms configured in a certain way, with the code (p,q) assigned in advance by a pair of coprime numbers, $p \neq q \neq 0$. A basic link w times repeats in an invariant unit, with w being a natural number. An invariant unit (necklace) is a macrocycle of certain configuration on the section of a nanotube and nanoring which t times repeats along their structures. The code of an invariant unit (p,q,w,c) also includes a literal chirality index c , which acquires either R or S values (enantiomers) or RS values (non-chiral structures) depending on the macrocycle configuration. A structural analysis shows that different invariant units are impossible to connect. Therefore, the invariant unit and the nanotube derived have the same number of isomers equal to $N/2$, where $N = 2(p+q)w$. The nanotube code is (p,q,w,c,t). There are only two types of non-chiral nanotubes ($c = RS$), such having parameters $p = 1, q = 0$ (zigzag) and $p = q = 1$ (armchair). In all other cases nanotubes are chiral. The nanoring code is (p,q,w,c,t,a,b). Integer parameters a and b include the result of connecting the nanotube ends into the nanoring with the right (plus) or left (minus) turn, full (a) or partial (b), around the ring axis ($a = \pm 1, \pm 2, \dots$; $b = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(w - 1)$) or with no turn ($a = b = 0$). If any of the parameters a and b is non-zero, the nanoring is chiral regardless of the nanotube it is formed of. The research shows that the most visual tool of modelling closed aromatic surfaces is the program package ChyperChem by HyperCube, Inc. There has been developed the high-speed NanoGen.tcl program which automatically designs nanorings and nanotubes and is based on the principle of their encoding. The RingSelect.exe program colours the chains of linearly annelated six-membered cycles for identification of nanoring structures and verifies their assembling. The thesis suggests a new mechanism of fullerene and nanotube formation from graphite in plasma, which excludes graphite atomisation into small fragments and retains the graphene layers. Along the layer edges, at high temperature and inert atmosphere, there appear rehybridisation defects (free valences), what results in formation of graphene troughs, the latter being the source of nanotubes and fullerenes. The molecular dynamics method has proved the crucial role of intermediate layers in mono- and multiplayer nanotube formation. There have been conducted PM3 (MD) computations of 38 (16) "guest-host" complexes of different calixarenes with C60 and C70 fullerenes as well as there have been calculated their energy parameters. C60 has been proved to efficiently interact with calix[4,5]arenes, while C70 - with higher calixarenes. The experimental analysis presents a stability constant of the *p*-tert-butylthiacalix[4]arene/C60 complex in toluene which equals $285 \text{ dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$. This calixarene does not form a complex with C70. Thus, the *p*-tert-butylthiacalix[4]arene allows to separate C60 and C70 fullerenes. Unlike the latter, the *p*-(*N*-methyl-*N*-phenylamino)methyl-thiacalix[4]arene forms complexes both with C60 (stability constant equals $11360 \text{ dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) and C70 ($98 \text{ dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$). According to the ^{13}C NMR spectroscopy data, these complexes better form in toluene than in 1,2-dichlorobenzene. Thus, fullerenes are profitable to isolate from fullerene soot using the *p*-(*N*-methyl-*N*-phenylamino)methyl-thiacalix[4]arene as a compound with a "host" molecule, toluene being a solvent. The thesis is the first comprehensive study of closed aromatic surface properties. The submitted thesis will make an essential contribution to stereochemistry, organic chemistry, supramolecular chemistry, science of materials, etc.

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. Корнілов Михайло Юрійович

2. Kornilov Mykhajlo Yuriyovych

Кваліфікація: д.х.н., 01.00.03

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. Льченко Андрій Якович

2. Льченко Андрій Якович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

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. Смик Сергій Юрійович

2. Смик Сергій Юрійович

Кваліфікація: к.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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Воловенко Юліан Михайлович

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

Воловенко Юліан Михайлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.