Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0414U002516

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-07-2014

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Філоненко Оксана В'ячеславівна
2. Filonenko Oksana Viacheslavivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 26-06-2014

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

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 хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Теоретичне дослідження структури та властивостей фулереноподібних молекулярних форм діоксиду кремнію

2. Theoretical study on the structure and properties of fullerene-like molecular forms of silicon dioxide.

Реферат/анотація:

1. Проведені розрахунки рівноважної будови та енергії когезії щодо структурних одиниць фулереноподібних молекул діоксиду кремнію (ФМДК) свідчать про енергетичну стійкість повністю координованих ФМДК складу (SiO2)N. Енергія зв'язування (SiO2)N неістотно відрізняється від енергій зв'язування експериментально одержаних твердотільних зразків діоксиду кремнію, що дозволяє зробити висновок про можливість експериментального одержання даних структур. Показана гідролітична нестабільність повністю координованих ФМДК, у присутності молекул води вони перетворюються на гідроксильовані молекули, які зв'язують молекули води водневим зв'язком у молекулярній формі. Гідроксильовані фулереноподібні молекули діоксиду кремнію (SiO2)N(H2O)N/2 можуть існувати у розчинах силікатних кислот як інтермедіати при гідротермальному та золь-гель синтезах систем на основі діоксиду кремнію. Виконані розрахунки частот, типів та інтенсивностей нормальних коливань атомів молекули (SiO2)20(H2O)10 показали досить добру узгодженність із експериментальним спектром порожнистих багатостінних наносфер діоксиду

кремнію, а також олігомерів силікатних кислот, молекули яких мають аналогічні структурні елементи. Тому молекули (SiO2)N(H2O)N/2 можуть бути придатними моделями для дослідження властивостей синтезованих порожнистих наносфер, які становлять певний науковий та практичний інтерес. Показано можливість використання як темплату молекули C60 при синтезі фулереноподібної молекули діоксиду кремнію (SiO2)60(H2O)30.

2. The calculations of the equilibrium structure and cohesive energy with related to structural units of fullerene-like molecules of silicon dioxide (FMSD) have testified the thermodynamic stability of the (SiO2)N - structures of fully coordinated FMSD. The binding energy of fully coordinated molecules (SiO2)N differs by a small amount from the respective experimentally obtained energy value for solid samples of silicon dioxide, suggesting the possibility of experimentally obtaining such structures. Hydrolytic instability of fully coordinated FMSD has been shown. In the presence of water molecules, they are converted to hydroxylated molecules. Hydroxylated FMSD (SiO2)N(H2O)N/2 can exist in solutions of silicic acids as intermediate during hydrothermal and sol-gel syntheses of silicon dioxide based systems. Calculations of frequencies, types and intensities of normal vibrations of atoms in the (SiO2)20(H2O)10 molecule showed quite good agreement with the experimental spectrum of multi-hollow silica nanospheres and silica oligomers, which have similar structural elements. Because of this, molecules like (SiO2)N(H2O)N/2 can be useful for studying the properties of the synthesized hollow nanospheres which have particular scientific and practical interest. A possibility to use C60 fullerene molecules as a template for the synthesis of silicon dioxide (SiO2)60(H2O)30 molecules has been shown.

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. Лобанов Віктор Васильович

2. Lobanov Viktor

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18, 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голуб Олександр Андрійович
2. Голуб Олександр Андрійович

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. Ільченко Микола Миколайович
2. Ільченко Микола Миколайович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.18

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	Тьортих Валентин Анатолійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Тьортих Валентин Анатолійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.