

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U100723

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Ольга Андріївна

2. Kovalenko Olha A.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.01

Назва наукової спеціальності: Фізика приладів, елементів і систем

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 26-03-2021

Спеціальність за освітою: прикладна математика

Місце роботи здобувача: Сумський державний університет

Код за ЄДРПОУ: 05408289

Місцезнаходження: вул. Римського-Корсакова, буд. 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, Україна

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 55.051.02

**Повне найменування юридичної особи:** Сумський державний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 05408289

**Місцезнаходження:** вул. Римського-Корсакова, буд. 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, 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:** Сумський державний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 05408289

**Місцезнаходження:** вул. Римського-Корсакова, буд. 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.35

**Тема дисертації:**

1. Фізичні процеси в спіропіранах як елементах молетроніки
2. Physical processes in spiroyrans as elements of moletronics

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню закономірностей, що обумовлюють зв'язок між молекулярною енергетичною структурою та формуванням механізмів перетворень у системі Сп – Мц, вивченню можливостей та умов побудови молекулярних пристроїв на їх основі. Показано, що зміна конфігурацій під час перетворення в системі Спіропіран – Мероціанін може бути використана для реалізації комірки пам'яті зі спектроскопічною диференціацією. Запропоновано використання СІ як замісника в індоліновому фрагменті, що призводить до зменшення енергетичного бар'єра в разі прямогоспіропіран п мероціанін-перетворення на 36 %, а в разі зворотного (мероціанін п спіропіран) – на 42 %. Одержано і досліджено механізм Сп-Мц-перемикання без впливу випромінювання: шляхом протонування молекули спіропірану. Установлено, що перехід протона не впливає на швидкість перемикання, а швидкість реакції визначається обертальними процесами в МцН+-конформерах, як і вразі нейтральної системи. З'ясовано, що

в цілому реакція є екзотермічною, що є протилежністю до випадку непротонованої системи, де реакція була ендотермічною. Установлено, що лінійне збільшення напруженості зовнішнього електричного поля зменшує величину енергетичного бар'єра переходу протона.

2. The thesis is devoted to the establishment of regularities that determine the relationship between the molecular energy structure and the formation of transformation mechanisms in the Spiropyran-Merocyanine system. Also it aims to study possibilities and conditions for building molecular devices based on the spiropyran molecule. It has been shown that changes of (in) configurations during the transformation in the spiropyran-merocyanine system can be used to implement a memory cell with spectroscopic differentiation. It has been proposed to use a Cl as a substitute in the indoline moiety that leads to the decreasing of the energy barrier by 36 % in the direct conversion and by 42 % in the reverse conversion. The mechanism of the Sp-Mc conversion (switching) without irradiation influence has been obtained and investigated. It can be achieved by protonation of the spiropyran molecule. It has been found that proton transfer has no effect on the switching rate. Rotational processes of McH<sup>+</sup> conformers are the rate determining steps. It has been found out that the overall reaction is exothermic, that is opposite to the case of the non-protonated system, where it was endothermic. It has been demonstrated that a linear increasing of the external electric field strengths decreases the energy barrier during proton transfer.

**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. Лопаткін Юрій Михайлович

2. Lopatkin Yurii M.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.01

**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. Марченко Олександр Анатолійович
2. Marchenko Oleksandr A.

**Кваліфікація:** д.ф.-м.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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Одаренко Євген Миколайович
2. Odarenko Yevhen M.

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.01

**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**

Чорноус Анатолій Миколайович

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

Чорноус Анатолій Миколайович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.