

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U002207

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-06-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карауш Наталія Миколаївна

2. Karaush Nataliia Mykolaivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 12-05-2017

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка, 81

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 64.051.14

**Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

**Місцезнаходження:** майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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:** Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

**Код за ЄДРПОУ:** 02125622

**Місцезнаходження:** 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка, 81

**Форма власності:**

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

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.03

**Тема дисертації:**

1. Дослідження ароматичності і спектральних властивостей гетероанельованих циклооктатетраєнів з врахуванням вібронних ефектів
2. A study of the aromaticity and spectral properties of heteroannelated cyclooctatetraenes taking into account vibronic effects

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню ароматичності та електронно-спектральних властивостей частково та повністю гетероанельованих циклооктатетраєнів та сітчастих полімерів на основі тетраокса[8]циркуленів в контексті їх застосування для потреб нанофотоніки та фотовольтаїки. У роботі показано, що усі досліджувані молекули гетероанельованих циклооктатетраєнів мають антиароматичний внутрішній восьмичленний цикл за рахунок наявності паратропних кільцевих струмів, в той час як ароматичний характер анельованої частини, навпаки, обумовлений діатропним кільцевим струмом. Як наслідок, досліджувані молекули можна розглядати як неароматичні сполуки, в яких діатропний і паратропний кільцевий струми взаємно компенсують один одного.

2. The thesis is devoted to the research of aromaticity, electronic and spectral properties of the partially and fully heteroannelated cyclooctatetraenes and cross-linked polymers based on tetraoxa[8]circulenes in context of their nanophotonics and photovoltaics applications. It is shown in the thesis, that all studied heteroannelated cyclooctatetraene molecules have antiaromatic inner eight-membered cycle due to the high paratropic contribution, while the aromatic character of annelated part is caused by diatropic ring current. As a result, the studied molecules can be considered as non-aromatic compounds in which diatropic and paratropic ring currents mutually compensate each other.

**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. Мінаєв Борис Пилипович

2. Minaiev Borys Pylypovych

**Кваліфікація:** д.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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Баб'юк Дмитро Петрович
2. Баб'юк Дмитро Петрович

**Кваліфікація:** д.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**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Черановський Владислав Олегович
2. Черановський Владислав Олегович

**Кваліфікація:** д.ф.-м.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**

Дорошенко Андрій Олегович

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

Дорошенко Андрій Олегович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.