

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003275

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-10-2024

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Таточенко Михайло Олексійович

2. Mykhailo O. Tatochenko

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Колоїдна хімія

Дата захисту: 17-10-2024

Спеціальність за освітою: Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.209.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут біологічної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05402714

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут біологічної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05402714

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.35, 31.15.37, 31.15.39

Тема дисертації:

1. Колоїдні процеси в системах наповнених анізотричними частинками. Моделювання процесів формування і реструктуризації, аналіз зв'язності і перколяційної поведінки.
2. Colloidal processes in systems filled with anisometric particles. Modeling the formation and restructuring processes, analysis of connectivity and percolation behavior. - Qualification scientific work as a manuscript.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню колоїдних процесів у системах, наповнених анізотричними частинками, зокрема, моделюванню процесів формування і реструктуризації, аналізу зв'язності та перколяційної поведінки. Процеси адсорбції відіграють ключову роль у багатьох природних і техногенних процесах, таких як очищення води, створення адсорбентів для газів та в медицині. Зокрема, випадкова послідовна адсорбція (RSA) є фундаментальним процесом, що визначає структуру і властивості утворених адсорбційних шарів. Розуміння механізмів RSA та їх впливу на властивості матеріалів є важливим завданням для розвитку новітніх технологій. Метою роботи є вивчення кінетики формування та властивостей адсорбційних упаковок частинок анізотричної форми і визначення тенденцій їх

упорядкування. Дослідження транспортних властивостей перколяційної зв'язності та електропровідності одновимірних та двовимірних адсорбційних систем, які складаються з частинок одного або декількох типів. Визначення впливу просторового обмеження системи на характер пакування та дослідження двоетапних моделей осадження сумішей частинок. Наукова новизна роботи полягає в тому, що вперше досліджено вплив просторового розподілу орієнтації частинок на кінетику осадження та структуру адсорбційних осадів; поведінку просторово-обмежених RSA упаковок, наповнених анізотричними частинками; ефекти перколяції у RSA упаковках дископрямокутників; критичну товщину провідних оболонок для створення електропровідних адсорбційних плівок; розроблено оригінальну двоетапну RSA модель для сумішей частинок різного типу. Практичне значення роботи полягає в тому, що результати теоретичних досліджень можуть бути корисними при розробці нових наноматеріалів з контрольованими електропровідними і транспортними властивостями. Крім того, дані результати можуть мати важливе значення для розробки новітніх електронних та сенсорних пристроїв. Методи дослідження включають комп'ютерне моделювання, чисельні методи та статистичну обробку даних. Основні результати роботи свідчать про суттєвий вплив орієнтаційного упорядкування та аспектного відношення анізотричних частинок на кінетику формування та властивості RSA упаковок. Для 1D RSA моделей спостерігається тенденція упорядкування частинок перпендикулярно лінії розташування їх центрів у насичених упаковках. Для 2D RSA моделей значення аспектного відношення і параметра порядку суттєво впливають на структуру насичених упаковок, утворення дальньої зв'язності та поведінку електропровідності. Введення просторових обмежень для 2D RSA моделей суттєво змінює просторові і орієнтаційні розподіли частинок. Для 2D RSA моделей двоетапної адсорбції суміші дисків і дископрямокутників існує можливість тонкого регулювання зв'язності та транспортних властивостей отриманих RSA плівок.

2. The dissertation is dedicated to the study of colloidal processes in systems filled with anisometric particles, particularly focusing on modeling the processes of formation and restructuring, as well as analyzing the connectivity and percolation behavior. Adsorption processes play a key role in many natural and anthropogenic processes, such as water purification, creation of adsorbents for gases, and in medicine. In particular, random sequential adsorption (RSA) is a fundamental process that determines the structure and properties of the formed adsorption layers. Understanding the mechanisms of RSA and their impact on material properties is an important task for the development of new technologies. The aim of the work is to study the kinetics of formation and properties of adsorption packings of anisometric particles and to determine the trends of their ordering. The research focuses on the transport properties of percolation connectivity and electrical conductivity of one-dimensional and two-dimensional adsorption systems composed of particles of one or several types. The work also investigates the effect of spatial constraints on the packing nature and explores two-stage models of sedimentation of particle mixtures. The scientific novelty of the work lies in the first-time investigation of the influence of the spatial distribution of particle orientations on the sedimentation kinetics and structure of adsorption sediments; the behavior of spatially constrained RSA packings filled with anisometric particles; percolation effects in RSA packings of discorectangles; the critical thickness of conductive shells for creating electrically conductive adsorption films; and the development of an original two-stage RSA model for mixtures of different types of particles. The practical significance of the work is that the results of theoretical studies can be useful in the development of new nanomaterials with controlled conductive and transport properties. Furthermore, these results may be significant for the development of new electronic and sensor devices. The research methods include computer modeling, numerical methods, and statistical data processing. The main results of the work indicate a significant influence of orientational ordering and the aspect ratio of anisometric particles on the formation kinetics and properties of RSA packings. For 1D RSA models, there is a tendency for particles to order perpendicularly to the line of their centers' placement in saturated packings. For 2D RSA models, the aspect ratio and order parameter significantly affect the structure of saturated packings, the formation of long-range connectivity, and the behavior of electrical conductivity. Introducing spatial constraints for 2D RSA models significantly changes the spatial and orientational distributions of particles. For 2D RSA models of two-stage adsorption of mixtures of disks and discorectangles, there is a possibility for fine-tuning the connectivity and

transport properties of the resulting RSA films.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- N. I. Lebovka, M. O. Tatochenko, N. V. Vygornitskii, and Y. Y. Tarasevich, Paris Car Parking Problem for Partially Oriented Discorectangles on a Line, Phys. Rev. E 102, 012128 (2020).
- N. I. Lebovka, M. O. Tatochenko, N. V. Vygornitskii, A. V. Eserkepov, R. K. Akhunzhanov, and Y. Y. Tarasevich, Connectedness Percolation in the Random Sequential Adsorption Packings of Elongated Particles, Phys. Rev. E 103, 42113 (2021).
- N. I. Lebovka, M. O. Tatochenko, N. V. Vygornitskii, and Y. Y. Tarasevich, Relaxation of Saturated Random Sequential Adsorption Packings of Discorectangles Aligned on a Line, Phys. Rev. E 104, 064104 (2021).
- N. I. Lebovka, M. O. Tatochenko, N. V. Vygornitskii, and Y. Y. Tarasevich, Confinement Effects on the Random Sequential Adsorption Packings of Elongated Particles in a Slit, Phys. Rev. E 104, 054104 (2021).
- N. Lebovka, M. Petryk, M. O. Tatochenko, and N. V. Vygornitskii, Two-Stage Random Sequential Adsorption of Discorectangles and Disks on a Two-Dimensional Surface, Phys. Rev. E 108, 024109 (2023).

Наукова (науково-технічна) продукція: програмні продукти, програмно-технологічна документація; аналітичні матеріали

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лебовка Микола Іванович
2. Mykola Lebovka

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біологічної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05402714

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колотілов Сергій Володимирович
2. Sergii Kolotilov

Кваліфікація: д. х. н., член-кор. НАН України, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 31, Київ, 03028, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Міщук Наталія Олексіївна
2. Nataliia Mishchuk

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.11

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А. В. Думанського
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417348

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Олійник Вікторія Олександрівна
2. Viktoriia Oliinyk

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.11**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка
Національної академії наук України**Код за ЄДРПОУ:** 05402714**Місцезнаходження:** бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Національна академія наук України**Ідентифікатор ROR:****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Затовський Ігор Вікторович
2. Ihor Zatovskyi

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф. Д. Овчаренка
Національної академії наук України**Код за ЄДРПОУ:** 05402714**Місцезнаходження:** бульвар Академіка Вернадського, буд. 42, Київ, 03142, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Національна академія наук України**Ідентифікатор ROR:****VIII. Заключні відомості****Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Панько Андрій Валентинович

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

Панько Андрій Валентинович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Олійник В.О.

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна