

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U003996

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-11-2004

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Атамась Олександр Олексійович

2. Atamas Alexander Oleksiyovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 26-10-2004

Спеціальність за освітою: 7.07.01.04

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 26.001.08

**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:** 29.29.41

**Тема дисертації:**

1. Вплив молекул розчиненої речовини на структуру та термодинамічні властивості води.
2. The influence of the molecules of the soluted substance on the structure and thermodynamical properties of water.

**Реферат:**

1. Дисертацію присвячено визначенню впливу полярності та будови молекул розчиненої у воді речовини на зміну структури їх ближнього оточення та термодинамічних властивостей водних розчинів. Встановлено, що із збільшенням різниці значень дипольних моментів молекул розчиненої речовини і води збільшуються зміни структури ближнього оточення введеної молекули. Аналіз радіальних функцій розподілу, енергій міжмолекулярних взаємодій та числа найближчих сусідів для водного розчину етилового спирту при різному вмісті етанолу дозволив визначити концентрації, при яких утворюються кластери: при  $x_{et}=0.22$  м.д. утворюються кластери з молекул етанолу; при  $x_{et}=0.75$  м.д. починають утворюватись кластери з молекул води.

2. The thesis is devoted to the determination of the influence of the structure, po-la-ri-ty and concentration of the soluted substance on the structure and energetics of aqueous solutions at temperature 300 K. It was found out that the less polarity of the soluted molecule the stronger influence of that molecule on the change of the solution hydrogen bond net. The analysis of the radial distribution functions, the energies of intermolecular interactions and numbers of the nearest neighbours for the aqueous solution of ethanol at different concentrations has allowed to determine the concentrations at which the clusters are formed in the solution: at  $x_{et}=0.22$  м.д. the clusters of the ethanol molecules are formed; at  $x_{et}=0.75$  м.д. the clusters of the water molecules begin to form.

**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. Булавін Леонід Анатолійович

2. Bulavin Leonid Anatoliyovich

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.14

**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. Головка Мирослав Федорович
2. Головка Мирослав Федорович

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.02**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. Пучковська Галина Олександрівна
2. Пучковська Галина Олександрівна

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.05**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**

Доценко Іван Сергійович

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

Доценко Іван Сергійович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.