Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0515U000499

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-06-2015

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дорошенко Ірина Юріївна
2. Iryna Doroshenko

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 09-06-2015

Спеціальність за освітою: 8.070101

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: 29.17.01

Тема дисертації:

1. Нанорозмірні кластери у воднево-зв'язаних молекулярних рідинах

2. Nanoscale clusters in hydrogen-bonded molecular liquids

Реферат/анотація:

1. Досліджена проблема формування молекулярних асоціатів в рідинах з міжмолекулярним водневим зв'язком методами коливальної спектроскопії і квантово-хімічного моделювання. Досліджено спектроскопічні прояви процесів кластеризації в гомологічному ряді моногідроксильних спиртів від метанолу до деканолу, а також у третинному спирті трет-бутанолі. Шляхом ізоляції окремих молекул і невеликих кластерів спиртів у низькотемпературних матрицях і реєстрації коливальних спектрів при поступовому підвищенні температури матриці побудовано експериментальну модель структурних перетворень, які відбуваються в спиртах при фазовому переході від газу до рідини. З використанням результатів проведених в наближенні B3LYP/6-31G (d, p) квантово-хімічних розрахунків визначено кластерний склад досліджуваних зразків при різних температурах і показано, що перебудова кластерної структури в спиртах відбувається поступово від низькомолекулярних до високомолекулярних асоціатів.

Проведено аналіз ширин зареєстрованих смуг ІЧ поглинання і показано, що розширення спектральних смуг при підвищенні температури пов'язане зі збільшенням розмірів кластерів у зразку, зростанням їхнього конформаційного різноманіття, а також з обмеженим часом життя воднево-зв'язаних кластерів. Визначено вплив матеріалу ізолюючої матриці на особливості процесів асоціації молекул ізольованої речовини. Розраховано термодинамічні параметри різних кластерів спиртів і показано, що ентропійні ефекти призводять до позитивних значень зміни величини енергії Гіббса при формуванні як циклічних, так і ланцюжкових структур. Показано, що в спиртах з довшими алкільними ланцюжками стеричне відштовхування починає відігравати значну роль і конкурує з водневим зв'язком, внаслідок чого зростає відносна кількість ланцюжкових структур і мономерів.

2. The problem of molecular associates forming in liquids with intermolecular hydrogen bonds was investigated by methods of vibrational spectroscopy and quantum-chemical simulation. Spectroscopic manifestations of clustering processes in homologous series of monohydric alcohols from methanol to decanol as well as in tertial alcohol tert-butanol were investigated. Individual molecules and small alcohol clusters were isolated in low-temperature argon and nitrogen matrices. Their infrared spectra were registered during gradual heating of the matrix. These experiments allowed constructing an experimental model of the structure transformations in alcohols during the phase transition from gas to liquid. Quantum-chemical calculations of optimal geometries and corresponding vibrational spectra of different alcohol clusters were carried out in the approximation B3LYP/6-31G (d, p). The cluster compositions of the investigated samples at different temperatures were determined. It was shown that the transformation of cluster structure in alcohols occurs gradually from small clusters to bigger ones. The analysis of the bandwidths of the registered absorption bands was carried out. It was shown that the broadening of the spectral bands with temperature increasing is related to the increasing of cluster sizes in the sample, the growing of their conformational variety and shortening of the lifetime of hydrogen-bonded clusters. The effects of isolating matrix material on the peculiarities of the clustering process in the isolated substance were determined. It was shown that in the alcohols with longer alkyl chains (beginning from octanol), where the steric repulsion plays an important role and competes with hydrogen bonding, the relative number of chain structures and monomers increases.

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. Погорелов Валерій Євгенійович

2. Valeriy Ye. Pogorelov

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чалий Олександр Васильович
2. Чалий Олександр Васильович

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маломуж Микола Петрович
2. Маломуж Микола Петрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02, 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Давидова Надія Олександрівна
2. Давидова Надія Олександрівна

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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 Булавін Леонід Анатолійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Булавін Леонід Анатолійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.