Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002528

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-05-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Борисюк Віктор Іванович
2. Borysiuk Viktor I.

Кваліфікація: к. ф.-м. н.

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.05

Назва наукової спеціальності: Оптика, лазерна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-05-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.23

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: 02070499

Місцезнаходження: Володимирська, 64, м. Київ, Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.31, 29.33

Тема дисертації:

1. Вплив адсорбованих атомів, молекул і їх кластерів на елект-ронну структуру, провідність та оптичні властивості вуглецевих нанотрубок

2. Influence of adsorbed atoms, molecules and their clusters on the electronic structure, conductivity and optical properties of carbon nanotubes.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота стосується дослідження взаємодії атомів, молекул і їх кла-стерів з поверхнею вуглецевих нанотрубок, що містять різні дефекти внаслідок їх легування бором чи азотом або функціоналізації їх поверхні кисневмісними або амі-новмісними групами. Електронну структуру вуглецевих нанотрубок при адсорбції ними галогеноводнів HX (X=F, Cl, Br), молекулярних аніонів (MA) MVIO42- (MVI = 19 Cr, Mo, W) та молекулярних комплексів MI2CrO4 (MI = Li, Na, K) та MIICrO4 (MII = Ca, Zn, Cd, Hg, Pb) досліджено в наближенні молекулярного кластера із застосуван-ням теорії функціоналу електронної густини. Встановлено залежності характеристик адсорбції від положення молекулярних аніонів CrO42- на поверхні вуглецевих нано-трубок. Досліджено вплив катіонів M+ (M+ = Li, Na, K) та M2+ (M2+ = Ca, Zn, Cd, Hg,

Pb) на адсорбцію молекулярних аніонів поверхнею вуглецевих матеріалів. За допомо-гою розрахунків змодельовано вплив найбільш розповсюджених молекул атмосфер-ного середовища (H2O, N2 та O2) на адсорбцію аніонів CrO42- на поверхні вуглецевих нанотрубок. З'ясовано, що прості органічні функціональні групи підвищують адсор-бційну здатність вуглецевих нанотрубок у водному розчині стосовно хроматних мо-лекулярних аніонів. Проведено експериментальні дослідження і проаналізовано дані щодо особливостей спектроскопії комбінаційного розсіяння, поглинання, дифузного відбивання світла та люмінесценції поверхонь, які містять молекулярні комплекси K2CrO4, адсорбовані на поверхні вуглецевих нанотрубок.

2. The thesis deals with the study of the interaction of atoms, molecules and their clus-ters with the surface of carbon nanotubes with various defects: boron or nitrogen doping, or functionalization of the surface with oxygen- or ammonia-containing surface groups. The electronic structure of carbon nanotubes for adsorption hydrogen halide molecules HX (X = F, Cl, Br), molecular anions (MA) MVIO42- (MVI = Cr, Mo, W) and molecular complexes MI2CrO4 (MI = Li, Na, K) and MIICrO4 (MII = Ca, Zn, Cd, Hg, Pb) had been studied at the Density Functional Theory (DFT) level within molecular cluster approach using software package Gaussian 09. Calculations were performed for the cluster within B3LYP approximation for exchange-correlation functional. Calculated binding energies and values of electronic charges transferred to adsorbents were analysed, and the types of bonding between the investigated molecular compounds and the surface of carbon nano-tubes were identified. Adsorption characteristics dependence on the position of molecular anions CrO42- on the surface of carbon nanotubes was established. Effect of M+ (M+ =Li, Na, K) and M2+ (M2+ = Ca, Zn, Cd, Hg, Pb) cations on adsorption of molecular anions by the surface of carbon materials was studied. The influence of the most widely distributed atmospheric molecules (H2O, N2, O2) on CrO42- anions adsorption on the surface of carbon nanotubes was modelled in the calculations. It was found that simple organic functional groups increase the adsorption capacity of carbon nanotubes in an aqueous solution with respect to chromatic molecular anions. Experimental studies were carried out and analysis of the data those concern features of the Raman, absorption, diffuse reflection and lumi-nescent spectroscopy of the surfaces containing K2CrO4 molecular complexes adsorbed on the surface of carbon nanotubes was made.

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. Неділько Сергій Герасимович
2. Nedilko Serhii Herasymovych

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. Качковський Олексій Дмитрович
2. Kachkovskyi Oleksii D.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

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. Хижун Олег Юліанович
2. Khyzhun Oleh Yu.

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	Дмитрук Ігор Миколайович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Дмитрук Ігор Миколайович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.

