Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U000741

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-04-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чернолевська Єлизавета Анатоліївна

2. Chernolevska Yelyzaveta Anatoliivna

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: 28-03-2017

Спеціальність за освітою: 8.04020301

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: 29.17.19

Тема дисертації:

1. Кластерна структура одноатомних спиртів у конденсованому стані

2. Cluster structure of monohydric alcohols in condensed phase

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено з'ясуванню кластерної структури деяких одноатомних спиртів в конденсованому стані, зокрема, поблизу точки фазового переходу тверде тіло-рідина та визначенню відмінностей спектроскопічних проявів фазового переходу тверде тіло - рідина для спиртів з парною та непарною кількістю атомів вуглецю. Виконано квантово-хімічне моделювання для різних типів кластерів метанолу, 1-нонанолу та 1-деканолу, визначено просторову будову та енергетичні параметри всіх модельних структур, розраховані частоти спектрів ІЧ поглинання. Зроблено висновки щодо особливостей змін кластерної структури досліджуваних спиртів в конденсованій фазі. З'ясовано, що в області валентних коливань гідроксильної групи для метанолу та 1-деканолу спостерігається характерне зміщення смуг поглинання в область низьких частот при плавленні, що свідчить про перехід від менших кластерів до більших, а для 1 нонанолу - навпаки, смуга зміщується в область високих частот.

2. The thesis deals with the study of cluster structure of some monohydric alcohols in condensed phase, particularly near the point of phase transition solid - liquid and the study of differences in phase transition spectroscopic changes due to the number of carbon atoms in alcohol molecules oddness. Quantum-chemical calculations for different types of clusters of methanol, 1-nonanol and 1-decanol were carried out to get energetically optimal structure and IR absorption spectra for each cluster. The changes of cluster structure of investigated alcohols in condensed phase were determined. In spectral region of stretching O-H vibrations, characteristic red shift is observed for methanol and 1-decanol and blues shift is observed for 1-nonanol in melting process. These changes in spectra were assigned to transition from smaller clusters to bigger ones in methanol and 1-decanol, vice versa for 1-nonanol - spectral blue shift in process of heating was determined as a result of redistribution from bigger clusters to smaller ones.

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. Pogorelov Valeriy Yevgeniyovych

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. Бродин Олександр Михайлович

2. Бродин Олександр Михайлович

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. Карасевський Анатолій Ілліч

2. Карасевський Анатолій Ілліч

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

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.