# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0407U001273

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 28-03-2007

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Оберніхіна Наталія Володимирівна

2. Obernikhina Natalia Volodymyrivna

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 02.00.03

**Назва наукової спеціальності:** Органічна хімія

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 22-03-2007

**Спеціальність за освітою:** 7.070.301

**Місце роботи здобувача:** Інститут органічної хімії НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417325

**Місцезнаходження:** 02660, Київ-94,вул.Мурманська,5

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 26.217.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут органічної хімії НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417325

**Місцезнаходження:** вул.Мурманська,5, м. Київ, Київська обл., 02660, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут органічної хімії НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417325

**Місцезнаходження:** 02660, Київ-94,вул.Мурманська,5

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.21.15

**Тема дисертації:**

1. Електронні та спектральні властивості донорно-акцепторних поліметинових барвників

2. Electronic and spectral properties of the donor-acceptor polymethine dyes

**Реферат/анотація:**

1. Дисертація присвячена квантово-хімічному та спектральному дослідженню закономірностей впливу хімічної будови нейтральних донорно-акцепторних поліметинових барвників на їх будову та природу електронних переходів. На основі розрахунків показано полієноподібний характер ціанінових основ та мероціанінів. В молекулах з коротким хромофором визначальним є вплив кінцевих груп; при подовженні ланцюга до критичної довжини і більше досягається бірадикальний стан з вирівняними довжинами зв'язків та атомними зарядами. Для пояснення глибокого забарвлення мероціанінів запропоновано схему взаємодії квазі-локальних хромофорів, які включають спряжену систему кінцевої групи з поліметиновим ланцюгом. Нелінійно-оптичні дослідження показали, що в несиметричних основах ціанінів збільшення електронодонорності кінцевої групи приводить до зростання гіперполяризованостей, тому подібні сполуки є перспективними матеріалами для нелінійної оптики.

2. Dissertation deals with systematic quantum-chemical and spectral studies of structure and the nature of electron transitions of neutral donor-acceptor polymethine dyes. The polyene-like electron structure and

molecular geometry of the cyanine bases and merocyanines have been explained by the calculations. It has been shown that at the critical length the chromophor the bi-radical state emerges in which atomic charges as well as bond lengths are equalized. For the explanation of deep color and fluorescence of merocyanines, the scheme of the interaction of the quasi-local chromophores was proposed. Such chromophores include the conjugating system of terminal groups with the polymethine chain. On the basis of nonlinear optical studies, it was established that increasing the basicity of the terminal groups in the unsymmetrical cyanine bases is accompanied by a regular increase of the hyperpolarizibilities. That's why these compounds are promising for the creation of organic materials for nonlinear optics.

**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. Качковський Олексій Дмитрович
2. Kachkovsky Oleksiy Dmytrovitch

**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

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Ярмолюк Сергій Миколайович

2. Ярмолюк Сергій Миколайович

**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. Шиванюк Олександр Миколайович

2. Шиванюк Олександр Миколайович

**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

**Рецензенти**

## VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** Лозинський Мирон Онуфрійович

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

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Реєстратор**

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




Юрченко Т.А.