

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0401U003031

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-11-2001

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гнатюк Іван Іларіонович
2. Gnatyuk Ivan Ilarionovych

Кваліфікація:

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: 23-10-2001

Спеціальність за освітою: 7.070205

Місце роботи здобувача: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

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 26.159.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, 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 фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29.25, 29.31.17

Тема дисертації:

1. Спектроскопія міжмолекулярної взаємодії, динаміки та фазових переходів в гетерогенних системах на основі алкілціанобіфенілів

2. Spectroscopy of molecular interactions, dynamics and phase transitions in heterogeneous systems based on alkylcyanobiphenyls

Реферат:

1. Дисертація присвячена вивченню механізмів взаємодії полярних молекул наповнювачів з активними центрами поверхні каналів неорганічних нанопористих матриць в залежності від стану поверхні та зовнішніх чинників, особливостей впорядкування та динаміки цих молекул в каналах. Методами ІЧ спектроскопії (10 000 - 400 см⁻¹) досліджено низку гетерогенних систем на основі силікатних пористих стекел (діаметр пор 2 - 90 нм) та алюмосилікатних молекулярних сит типу МСМ-41 та Me₂+МСМ-41 (діаметр каналів 4 нм) з різним типом фізико-хімічного стану поверхні каналів, наповнених молекулами гомологічного ряду алкілціанобіфенілів (пЦБ) з різною довжиною алкільного ланцюга (n = 2-9). Для обох типів гетерогенних систем чітко виявлено відмінності в поведінці молекул пЦБ в каналах в порівнянні з об'ємним станом. Ці відмінності зумовлені двома факторами: насамперед наявністю активної поверхні, а також впливом малого розміру обмежуючого об'єму. Показано, що частина молекул в каналах знаходиться у зв'язаному стані,

взаємодіючи з АЦ поверхні шляхом утворення водневих зв'язків -OH...NeC- , або зв'язків координаційного типу з Me^{2+} . Встановлено, що тип та енергія цієї взаємодії залежать від типу передобробки поверхні. Запропоновано модель механізмів взаємодії молекул nЦБ з АЦ поверхні та на основі цієї моделі розроблено метод оцінки співвідношення кількості об'ємних (вільних) та зв'язаних молекул nЦБ. На основі результатів калориметричних та ЯМР досліджень встановлено, що АЦ поверхні МСМ являються дефектами структури і призводять до руйнування нематичного та кристалічного впорядкування молекул nЦБ в каналах. Виявлено, що обмеження об'єму призводить до сповільнення динаміки, як молекул в цілому, так і окремих молекулярних груп.

2. The thesis is devoted to the study of interaction mechanisms between polar molecules of fillers and active centers on the channel surface of inorganic nanoporous matrices dependent on the surface state and external factors, on peculiarities of the ordering and dynamics of these molecules in channels. A set of heterogeneous systems based on silicate porous glasses (pore diameter of 2-90 nm) and aluminosilicate molecular sieves of MCM-41 and Me^{2+} MCM-41 (channel diameter of 4 nm) with different types of the surface physicochemical state of channels filled with molecules of the homologous alkylcyanobiphenyls (nCB) row with a different length of the alkyl chain ($n=2-9$) has been investigated by methods of IR spectroscopy ($10000-400\text{ cm}^{-1}$). For both types of heterogeneous systems distinctions are clearly observed in the behavior of nCB molecules in channels compared to the bulk state. These differences are mainly due to two factors: first of all, the presence of the active surface, and also the influence of the small confining volume. It has been shown that a part of molecules in channels is in a bonded state, interacting with surface active centers by creation of either hydrogen bonds -OH...NeC- or bonds of the coordination type with Me^{2+} . The character and energy of this interaction have been established to depend on the surface pretreatment type. The model of interaction mechanisms between nCB molecules and surface active centers has been proposed. Based on this model the estimation method for the ratio of bulk (free) and bonded nCB molecules has been developed. Results of calorimetric and NMR studies demonstrate that MCM surface active centers are structure defects and lead to the destruction of the nematic and crystal arrangement of nCB molecules in channels. The volume confinement is found out to result in slowing of molecule dynamics of whole molecules, as well as separate molecular groups.

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. 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Погорелов Валерій Євгенович

2. Погорелов Валерій Євгенович

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Данчук Віктор Дмитрович

2. Данчук Віктор Дмитрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

