Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0517U000628

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-09-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Власова Наталія Миколаївна
2. Vlasova Nataliia Mykolaivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-09-2017

Спеціальність за освітою:

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

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): 26.210.01

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: 03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 17

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Кількісна оцінка адсорбційних рівноваг як реакцій комплексоутворення на поверхні поділу фаз кремнезем - водний розчин

2. Quantitative estimation of adsorption equilibria as complexation reactions onto silica - aqueous solution interface

Реферат/анотація:

1. Адсорбцію широкого кола хімічних сполук різної природи розглянуто в термінах теорії комплексоутворення на поверхні. Розроблено та розвинуто конструктивний підхід для вибору реакцій комплексоутворення, який базується на співставленні стану розчиненої речовини і функціональних груп поверхні кремнезему в залежності від pH, іонної сили і концентрації компонентів розчину. З використанням базової моделі Штерна та програми GRFIT визначено константи іонізації силанольних груп та константи рівноваги реакцій комплексоутворення молекул та йонів з нейтральними й іонізованими силанольними групами. Показано, що речовини основної природи сорбуються переважно у вигляді катіонів з утворенням зовнішньосферних комплексів. Адсорбція малорозчинних речовин обумовлена гідрофобним виштовхуванням з водного розчину, чому сприяє зниження діелектричної проникності води поблизу поверхні оксиду. Іони перехідних металів утворюють на поверхні кремнезему внутрішньосферні комплекси.

Наявність в розчинах органічних сполук приводить до формування потрійних (різнолігадних) комплексів, в яких силанольні групи виступають у ролі лігандів. Визначені константи стійкості утворених на поверхні кремнезему комплексів. Будову адсорбційних комплексів підтверджуено спектроскопічними методами. Одержані результати дозволяють прогнозувати адсорбційні властивості кремнезему щодо хімічних сполук різної природи. Використовуючи залежності адсорбції від фізико-хімічних параметрів, можна передбачити умови створення матеріалів з наперед заданими властивостями, наприклад, лікарських препаратів пролонгованої дії з контрольованим вивільненням активних компонентів.

2. The adsorption of a number of chemical compounds of various nature is considered in terms of the surface complextion theory. A constructive approach to the choice of complex formation reactions is developed, which is based on the comparison of the state of the solute and the functional groups of the silica surface, depending on the pH, ionic strength and concentration of the components of the solution. Using the basic Stern model and the GRFIT program, the ionization constants of the silanol surface groups and the equilibrium constants of complex formation reactions between molecules and ions and neutral or ionized silanol are determined. It is shown that substances of the basic nature are sorbed predominantly in the form of cations with the formation of outer-sphere complexes. Adsorption of low soluble substances is due to hydrophobic repulsion from the aqueous solution, which is facilitated by a decrease of dielectric permittivity of water near the surface of oxide. Transition metal ions form on the silica surface inner- sphere complexes, and the presence of organic compounds in solutions leads to the formation of ternary (mixed ligand) complexes in which silanol groups act as ligands. Stability constants of these adsorption complexes are determined. Their structures are confirmed by spectroscopic technique. The obtained results allow predicting the adsorption properties of silica in relation to chemicals of a different nature. Using the dependence of adsorption on physicochemical parameters, it is possible to predict conditions for the creation of materials with predetermined properties, for example, drugs of prolonged action with controlled release of active components.

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)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Огенко Володими Михайлович

2. Огенко Володими Михайлович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04, 02.00.04

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. Запорожець Ольга Антонівна

2. Запорожець Ольга Антонівна

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.02, 02.00.02

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. Манорик Петро Андрійович

2. Манорик Петро Андрійович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01, 02.00.01

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 Картель Микола Тимофійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Картель Микола Тимофійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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