

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0412U004592

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-11-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зубар Олена Володимирівна

2. Zubar Olena Volodymyrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.01

Назва наукової спеціальності: Неорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 17-10-2012

Спеціальність за освітою: 8.04010103

Місце роботи здобувача: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

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.41.219.01

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: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

### V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.19

Тема дисертації:

1. Синтез і люмінесцентні властивості фосфатів кальцію, активованих іонами лантанідів
2. Synthesis and luminescence properties of calcium phosphates doped with lanthanides

Реферат:

1. Дисертаційну роботу присвячено з'ясуванню залежності між умовами синтезу, кристалічною структурою й люмінесцентними властивостями активованих іонами лантанідів  $\text{NaCaPO}_4$  і  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ , оптимізації хімічного складу й умов синтезу функціональних матеріалів на їх основі. Розроблено спосіб одержання функціональних матеріалів на основі  $\text{NaCaPO}_4$  шляхом термолізу гібридного кристал-аморфного прекурсорю, що містить  $\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x\text{HPO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $n = 0-2$ ) у якості кристалічної фази. Перевага цього способу синтезу - низька температура утворення  $\text{NaCaPO}_4$  ( $450^\circ\text{C}$ ). Показано, що використання у якості прекурсорю  $\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x\text{HPO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  дозволяє поліпшити гранулометричний склад перспективного люмінофора  $\text{NaCaPO}_4:\text{Eu}^{2+}$  і навіть при порівняно високій температурі випалу ( $950^\circ\text{C}$ ) одержати матеріал з розміром часток 1-5 мкм. На основі даних люмінесцентної спектроскопії встановлено, що іони  $\text{Eu}^{2+}$  займають в  $\text{NaCaPO}_4$  переважно позиції лужноземельного металу. Електронна будова  $\text{NaCaPO}_4$  у значній мірі визначається ізольованими фосфатними групами  $\text{PO}_4$ . Вивчено вплив умов синтезу й концентрації іонів лантаніду  $\text{Ln}^{3+}$  ( $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Ce}^{3+}$ ) на характер їх розподілу по позиціях Ca в структурі  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ .

Встановлено, що при відносно малих концентраціях ( $\ll 1$  ат.%) іони  $\text{Ln}^{3+}$  займають переважно позиції  $\text{Ca(I)}$ . Зі збільшенням концентрації іонів лантаніда частка  $\text{Ln}^{3+}$  у позиціях  $\text{Ca(II)}$  суттєво зростає. Вплив умов синтезу на розподіл іонів лантанідів по позиціях ЛЗМ у ГАП має складний характер і визначається процесами формування й взаємодії дефектів різної природи. Ключові слова: фосфати кальцію, гідроксиапатит, низькотемпературний синтез, люмінесценція, електронна будова.

2. The thesis is devoted to study of the relationship between the synthesis conditions, crystal structure and luminescence properties of lanthanide doped  $\text{NaCaPO}_4$  and  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ , the optimization of chemical composition and the preparative conditions of functional materials based on them. A method for obtaining functional materials based on the  $\text{NaCaPO}_4$  is developed. It implies thermolysis of the hybrid crystal-amorphous precursor containing  $\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x\text{HPO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $n = 0-2$ ) as a crystalline phase. The advantage of this method is the low temperature of the  $\text{NaCaPO}_4$  formation ( $450^\circ\text{C}$ ). It is shown that the use as a precursor of  $\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x\text{HPO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  allows to improve the particle size distribution of  $\text{NaCaPO}_4$ :  $\text{Eu}^{2+}$  - a promising phosphor for light-emitting diodes. Even at relatively high temperature of the annealing ( $950^\circ\text{C}$ ), a luminescent material with particles' size of 1-5 microns was obtained. Based on the results of luminescence spectroscopy it is shown that  $\text{Eu}^{2+}$  ions occupy in  $\text{NaCaPO}_4$  predominantly positions of alkaline earth metal. The electronic structure of  $\text{NaCaPO}_4$  is mainly determined by the isolated phosphate groups  $\text{PO}_4$ . The effect of synthesis conditions and  $\text{Ln}^{3+}$  ( $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Ce}^{3+}$ )-concentration on the distribution of lanthanide ions on Ca-positions in the structure of  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  was studied. It was found that at relatively low concentrations ( $\ll 1$  ат.%)  $\text{Ln}^{3+}$  ions occupy mainly the  $\text{Ca(I)}$  positions. With increasing concentration of lanthanide ions their fraction in the  $\text{Ca(II)}$  position increases significantly. The influence of synthesis conditions on the distribution of the lanthanide ions on the calcium positions in  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  is complex and determined by the processes of formation and interaction of different defects. Key words: calcium phosphates, hydroxyapatite, low-temperature synthesis, luminescence, electronic structure.

**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. Доценко Володимир Павлович

2. Dotsenko Volodymyr Pavlovich

**Кваліфікація:** д.х.н., 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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Затовський Ігор Вікторович

2. Затовський Ігор Вікторович

**Кваліфікація:** д.х.н., 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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Магунов Ігор Робертович

2. Магунов Ігор Робертович

**Кваліфікація:** к.х.н., 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

Антонович Валерій Павлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні

Антонович Валерій Павлович

Відповідальний за підготовку  
облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності



Юрченко Т.А.