

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003075

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-09-2024

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чернюк Оксана Анатоліївна

2. Oksana A. Cherniuk

Кваліфікація: 102

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізична хімія, хімія поверхні

Дата захисту: 24-10-2024

Спеціальність за освітою: Біологія

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

### III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** ДФ 26.210.6871

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

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

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

### V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.

**Тема дисертації:**

1. Синтез, модифікування та застосування багат шарових вуглецевих нанотрубок для молекулярного армування склопластиків на основі епоксидних смол
2. Synthesis, modification and application of multiwall carbon nanotubes for molecular reinforcement of fiberglass based on epoxy resins

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена розробці методів модифікування вуглецевих нанотрубок (ВНТ) Оксигеном (О-ВНТ) анодним окисненням, Нітрогеном (N-ВНТ) у процесі CCVD-синтезу ВНТ для одержання ефективних армуючих наповнювачів епоксидного в'язучого склопластиків з амінним отверджувачем, їх оптимізації за складом і вмістом, та каталізу окисно-відновних реакцій. Оптимізована методика аерозольного синтезу складного оксидного каталізатора  $(1...3)Al : Fe : (0,04...0,21)Mo-O$ , що включає використання водного розчину сполуки алюмінію з мурашиною кислотою та сполук феруму (III) цитрат і цитратний комплекс молібдену (IV), подачу у електропіч або полум'я пропан-бутанового пальника виконують ультразвуковим змішувачем-розпилювачем і збирають порошок каталізатору на електрофільтрі.

Розроблено спосіб синтезу N-ВНТ CCVD-методом на складному каталізаторі Al-Fe-Mo-O з використанням як прекурсорів ацетонітрилу, етилендіаміну та їх сумішей з пропіленом — основним джерелом Карбону, за температур 750–780 °C, який дає можливість регулювати вміст Нітрогену в межах 0,6–4,6 ат.% та співвідношення його різних станів. Встановлено, що питома поверхня ВНТ і вміст Оксигену за їх анодного окиснення є немонотонною функцією від кількості пропущеної електрики й корелюють між собою. CVD-метод прямого синтезу дозволяє отримати N-ВНТ із більшим вмістом Нітрогену, переважно пірольного та четвертинного типу, і високою каталітичною активністю в окисно-відновних реакціях. Незалежно від методу синтезу N-ВНТ, експериментально встановлено, що максимальна каталітична активність при розкладанні гідроген пероксиду спостерігається при pH 7. Вперше виявлено синергетичний ефект збільшення майже вдвічі міцності модельних зразків склопластику за умови введення нативних (гідрофобних) ВНТ у отверджувач, а окиснених ВНТ (O-ВНТ) в епоксидне в'язуче проти зразків із таким же вмістом ВНТ в однаковому стані (нативні або окиснені). Із використанням квантово-хімічних розрахунків, запропоновано схему хімічних процесів, що пояснюють ефект впливу хімічного стану поверхні ВНТ на процеси полімеризації епоксидної смоли: в однаково заряджених O-ВНТ відсутня тенденція до зворотної агломерації, вони каталізують полімеризацію епоксидної смоли, а амінний отверджувач виконує функцію ПАР щодо гідрофобних ВНТ, що також перешкоджає зворотній агломерації ВНТ, а разом ці явища приводять до синергетичного ефекту збільшення міцності композиту. Ключові слова: аерозольний синтез, каталітичне осадження з газової фази, вуглецеві нанотрубки, анодне окиснення, N-ВНТ, O-ВНТ, склопластики, синергетичний ефект, каталітична активність, квантово-хімічне моделювання.

2. The dissertation is devoted to the development of methods for modifying carbon nanotubes (CNTs) with oxygen by anodic oxidation, nitrogen in the process of CCVD synthesis of CNTs, to obtain effective reinforcing fillers of epoxy binder fiberglass with an amine hardener, their optimization in terms of composition and content, and the catalysis of redox reactions. It was optimized method of aerosol synthesis of the complex oxide catalyst  $(1...3)Al : Fe : (0,04...0,21)$ , which includes the use of an aqueous solution of the compound of aluminum with formic acid and the compound of ferrum (III) citrate and the citrate complex of molybdenum (IV), feeding into an electric furnace or propane-butane burner's flame using an ultrasonic mixer-sprayer, and the catalyst powder is collected on an electrostatic precipitator. A method for the synthesis of N-CNTs by the CCVD method on a complex catalyst Al-Fe-Mo-O was developed using as a precursor acetonitrile, ethylenediamine and their mixtures with propylene — the main source of carbon, at temperatures of 750–780 °C, which makes it possible to regulate nitrogen content in the range of 0.6–4.6 at.% and the ratio of its various states. It was established that the specific surface area of CNTs and the oxygen content during their anodic oxidation are a non-monotonic function of the amount of electricity passed and are correlated with each other. The CVD method of direct synthesis allows to obtain N-CNTs with a higher nitrogen content, mainly of pyrrole and quaternary type, and high catalytic activity in redox reactions. Regardless of the method of synthesis of N-CNTs, the maximum catalytic activity in the decomposition of hydrogen peroxide is observed at pH 7. It was established that the specific surface area of CNTs and the oxygen content during their anodic oxidation are a non-monotonic function of the amount of electricity passed through. For the first time, the synergistic effect of increasing the strength of fiberglass model samples by almost two times under the condition of introducing the initial (hydrophobic) CNTs into the hardener, and oxidized CNTs (O-CNTs) into the epoxy binder, compared to samples with the same content of CNTs in the same state (initial or oxidized). Using quantum chemical calculations, a scheme of chemical processes is proposed that explains the effect of the chemical state of the surface of CNTs on the polymerization of epoxy resin: equally charged O-CNTs have no tendency to reverse agglomeration, they catalyze the polymerization of epoxy resin, and the amine hardener performs the function of a surfactant in relation to initial hydrophobic CNTs, which also prevents the reverse agglomeration of CNTs, and together these phenomena lead to a synergistic effect of increasing the strength of the composite. Keywords: aerosol synthesis, catalytic vapors deposition, carbon nanotubes, anodic oxidation, N-CNT, O-CNT, fiberglass, synergistic effect, catalytic activity, quantum chemical modeling.

**Державний реєстраційний номер ДіР: 0115U004530**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Нові речовини і матеріали

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

**Підсумки дослідження:** Нове вирішення актуального наукового завдання

### **Публікації:**

- M.I. Terets, E.M. Demianenko, S.V. Zhuravsky, O.A. Chernyuk, V.S. Kuts, A.G. Grebenyuk, Yu.I. Sementsov, L.M. Kokhtych, M.T. Kartel. Quantum chemical study on the interaction of carbon nanotube with polyethylene and polypropylene oligomers. *Himia, Fizika ta Tehnologija Poverhni* 10, p. 75–86 (2019). <https://doi.org/10.15407/hftp10.01.075>
- M. Kartel, E. Demianenko, O. Cherniuk, M. Terets, Yu. Sementsov, B. Wang. Quantum-Chemical Estimating Interaction of sp<sup>2</sup>-Carbon Nanoclusters with PE and PP Oligomers. *Journal of Materials Science and Chemical Engineering* 7, p. 1–11 (2019). <https://doi.org/10.4236/msce.2019.77001>
- Yu. Sementsov, O. Cherniuk, G. Dovbeshko, S. Zhuravskiy, S. Makhno, B. Wang, M. Kartel. Glass-Reinforced Plastic Filled by Multiwall Carbon Nanotubes and Their Modified Forms. *Journal of Materials Science and Chemical Engineering* 7, p. 26–35 (2019). <https://doi.org/10.4236/msce.2019.77004>
- O.A. Cherniuk, E.M. Demianenko, M.I. Terets, S.V. Zhuravskiy, S.M. Makhno, V.V. Lobanov, M.T. Kartel, Yu.I. Sementsov. Study of the mechanism of influence of carbon nanotubes surface chemistry on the mechanical properties of fiberglass. *Applied Nanoscience* 10, p. 4797–4807 (2020). <https://doi.org/10.1007/s13204-020-01448-1>.
- Yu. I. Sementsov, O. A. Cherniuk, S. V. Zhuravskiy, Wang Bo, K. V. Voitko, O. M. Bakalinska, M. T. Kartel. Synthesis and catalytic properties of nitrogencontaining carbon nanotubes. *Himia, Fizika ta Tehnologija Poverhni* 12(2), p. 135– 143 (2021). <https://doi.org/10.15407/hftp12.02.135>
- Yu. Sementsov, Weiyong Yang, O. Cherniuk, K. Ivanenko, M. Kartel, S. Makhno, S. Zhuravskiy. Synergistic effect of the strength increasing of fiberglass by reinforcing epoxy binder with carbon nanotubes. *Applied Nanoscience* 13(7), p. 5313–5321. <https://doi.org/10.1007/s13204-023-02763-z>
- Патент № 126624 України від 02.11.2022. Заявка на винахід № a202104609 від 10.08.2021. Бюл. 44 від 02.11.2022. Спосіб виготовлення склопластику // Семенцов Ю.І, Чернюк О. А., Махно С.М., Картель М.Т, Гождзінський С.М., Іваненко К.О., Журавський С.В., Дин Анг (CN), Ван Бо (CN), Ван Дунсин (CN), Ли Тяньцзюнь (CN).
- Патент України на корисну модель № 132497 від 25.02.2019, бюл. № 4, 25.02.2019. Спосіб одержання каталізатора для синтезу вуглецевих нанотрубок // Чернюк О.А., Журавський С.В., Ігнатенко О.М., Картель М.Т., Каплуненко В.Г., Махно С.М., Семенцов Ю.І.
- O.A. Cherniuk, S.V. Zhuravsky, Yu.I. Sementsov, M.T. Kartel. Characteristics of elastomers filled with carbon nanotubes. *Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, physics and technology of surface”* (Kyiv, 23–24 May 2018), p. 37.
- O.A. Cherniuk, S.V. Zhuravsky, Yu.I. Sementsov, M.T. Kartel. Characteristics of elastomers filled with carbon nanotubes. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials»* (Kyiv, 27–30 August 2018), p. 344.
- O.A. Чернюк, С.В. Журавський, Ю.І. Семенцов, М.Т. Картель. Синтез складного металоксидного каталізатора для росту вуглецевих нанотрубок пірогенним методом. III Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (м. Житомир, 17 квітня 2019), с. 166–167.
- O.A. Cherniuk, G.I. Dovbeshko, S.V. Zhuravskiy, S. Makhno, M.T. Kartel, Yu.I. Sementsov. Study of glass-reinforced plastic, filled by surface modified multiwall carbon nanotubes. Characteristics of elastomers filled with carbon nanotubes. *Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, physics and technology of surface”* (Kyiv, 15–17 May 2019), p. 46.

- O.A. Cherniuk, S.V. Zhuravskiy, Makhno S. M., Yu.I. Sementsov, M.T. Kartel. Research of structures made of polymer composite materials filled with carbon nanotubes. International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (Lviv, 27–30 August, 2019), p 160.
- O. Cherniuk, Weiyou Yang, Yu. Grebelna, K. Ivanenko, M. Kartel, Yu. Sementsov, L. Ushakova, S. Zhuravskiy. Modification of carbon nanotubes by oxygen and nitrogen. Ist International research and practice conference «Nanoobjects and nanostructuring», (Lviv, 20–23 September, 2020), p.10.
- О.А. Чернюк, Е.М. Дем'яненко, М.І. Терець, С.В. Журавський, С.М. Махно, В.В. Лобанов, М.Т. Картель, Ю.І. Семенцов. Дослідження механізму впливу хімії поверхні вуглецевих нанотрубок на механічні властивості склопластиків. IV Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (м. Житомир, 29 квітня 2020), с. 110–111.
- O.A. Cherniuk, S.V. Zhuravskiy, S. Makhno, M.T. Kartel, Yu.I. Sementsov. Synergistic effect of increasing the strength of the composite with the simultaneous addition of carbon nanotubes and their oxidized forms. Characteristics of elastomers filled with carbon nanotubes. Ukrainian Conference with International Participation «Chemistry, physics and technology of surface» (Kyiv, 21–22 October 2020), p. 46.
- O.A. Cherniuk, S.V. Zhuravskiy, Yu.I. Sementsov, M.T. Kartel, K.V. Voitko, O.M. Bakalinska. Synthesis and catalytic properties of nitrogen-containing carbon nanotubes. International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (Lviv, 25–27 August, 2021), p. 151.
- M.T. Kartel., Yu.I. Sementsov, O.A. Cherniuk, E.M. Demianenko, Yu.V. Grebelna, S.M. Makhno, M.I. Terets, S.V. Zhuravskiy. Synergistic effect of the strength increasing of fiberglass by reinforcing epoxy binder with carbon nanotubes. EPF European Polymer Congress 2022 (Prague, 26 June–1 July 2022), p. 316.
- O. Cherniuk, V. Tolmachova, S. Zhuravskiy, M. Terets, E. Demianenko, Y. Sementsov, M. Kartel Synthesis and Properties of Layered Materials Based on Epoxy Binder Reinforced with Carbon Nanotubes and their Oxygen-modified Forms. IEEE 12th International Conference “Nanomaterials: Applications & Properties” (IEEE NAP-2022). (Kraków, Poland, 11–16 September, 2022), p. 01nssa-34.

**Наукова (науково-технічна) продукція:** матеріали; методи, теорії, гіпотези

**Соціально-економічна спрямованість:** поліпшення стану навколишнього середовища; зменшення зносу обладнання

**Охоронні документи на ОПВ:**

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Патент № 126624 України від 02.11.2022. Заявка на винахід № а202104609 від 10.08.2021. Бюл. 44 від 02.11.2022. Спосіб виготовлення склопластику // Семенцов Ю.І, Чернюк О. А., Махно С.М., Картель М.Т, Гождзінський С.М., Іваненко К.О., Журавський С.В., Дин Анг (CN), Ван Бо (CN), Ван Дунсин (CN), Ли Тяньцзюнь (CN). Патент України на корисну модель № 132497 від 25.02.2019, бюл. № 4, 25.02.2019. Спосіб одержання каталізатора для синтезу вуглецевих нанотрубок // Чернюк О.А., Журавський С.В., Ігнатенко О.М., Картель М.Т., Каплуненко В.Г., Махно С.М., Семенцов Ю.І.

**Впровадження результатів дисертації:** Впроваджено

**Зв'язок з науковими темами:** 0119U100272

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Семенцов Юрій Іванович

2. Yurii I. Sementsov

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.18

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-5046-811X

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

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

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Гусакова Крістіна Геннадіївна

2. Kristina G. Gusakova

**Кваліфікація:** к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.06

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-0827-7042

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії високомолекулярних сполук Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417041

**Місцезнаходження:** Харківське шосе, буд. 48, Київ, 02160, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Тереміленко Катерина Володимирівна

2. Kateryna Terebilenko

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-2403-4347

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

### **Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Прокопенко Сергій Леонідович

2. Serhii L. Prokopenko

**Кваліфікація:** к.х.н., с.д., 01.04.18

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-9770-9504

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Казакова Ольга Олександрівна

2. Olga O. Kazakova

**Кваліфікація:** к.х.н., с.д., 01.04.18

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-1101-5817

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

## **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Гулько Володимир Мусійович

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

Гулько Володимир Мусійович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Дацюк Андрій Михайлович

**Реєстратор**

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна