

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0510U000525

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-06-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зуб Юрій Леонідович

2. Zub Yuriy Leonidovych

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: 17-06-2010

Спеціальність за освітою: 7.070301

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):** Д 64.051.14

**Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

**Місцезнаходження:** майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

**Форма власності:**

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

**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. Функціоналізовані органокремнеземи: синтез, будова, фізико-хімічні властивості
2. Functionalized Organo-Silicas: Synthesis, Structure, Physico-Chemical Properties

**Реферат:**

1. Об'єкти дослідження: гібридні органо-неорганічні матеріали, представлені такими класами як функціоналізовані полісилоксанові та полісілсесквіоксанові ксерогелі та мезопоруваті кремнеземи. Мета дослідження: Полягала у встановленні залежностей, що відбивають вплив природи вихідних компонентів та умов золь-гель та темплатного методів синтезу на основні фізико-хімічні та структурно-адсорбційні характеристики гібридних органо-неорганічних матеріалів, розробці шляхів спрямованого синтезу полісилоксанових і полісілсесквіоксанових ксерогелів та мезопоруватих кремнеземів з моно-, бі- та трифункціональним поверхневим шаром, до складу якого входили б азот-, фосфор-, кисень- та сірковмісні функціональні групи. Методи дослідження: Квантово-хімічний метод і комплекс фізичних методів: термічний та рентгенофазовий аналіз, скануюча та просвічуюча електронна мікроскопія, атомна силова мікроскопія, коливальна (ІЧ і КР) та твердотільна поліядерна ЯМР спектроскопія, електронна спектроскопія дифузного відбиття, метод металозонду в ЕПР спектральному варіанті, адсорбційний метод. Теоретичні та практичні результати: Розроблено загальний підхід до синтезу полісилоксанових і полісілсесквіоксанових

ксерогелів та мезопоруватих кремнеземів з поліфункціональним поверхневим шаром, що містить комплексоутворюючі групи. На підґрунті встановлених залежностей відкриваються шляхи синтезу нових гібридних органо-неорганічних матеріалів, в тому числі сорбентів із запрограмованими основними характеристиками. Одержані сорбенти є перспективними для селективного вилучення та концентрування важких металів, зокрема, благородних, а також лантанодів та актиноідів з технологічних розчинів. Новизна: Розроблено методики синтезу полісилоксанових та полісилсесквіоксанових ксерогелів, що містить аміні, тіольні, карбоксильні, (тіо)сечовинні та (тіо)фосфорильні функціональні групи. Встановлено вплив природи функціональної групи і умов синтезу на структурно-адсорбційні характеристики ксерогелів з монофункціональним поверхневим шаром. Розроблено методики синтезу ксерогелів з біфункціональним поверхневим шаром, що містить комбінації різних за природою функціональних груп. Розроблено темплатний метод синтезу мезопоруватих кремнеземів з моно-, бі- і трифункціональним поверхневим шаром, які мають високі значення питомої поверхні (700 - 1300 м<sup>2</sup>/г) і високий вміст комплексотвірних груп (до 2 ммоль/г). На основі даних фізичних методів розвинуто уявлення про будову поверхні гібридних органо-неорганічних матеріалів. Встановлено високу сорбційну здатність синтезованих матеріалів щодо іонів важких металів, РЗЕ, ураніл-іону. Сформульовано положення щодо наукових засад спрямованого синтезу гібридних адсорбційних органо-неорганічних матеріалів. Галузь використання: Сорбційні технології, каталіз, біосенсорика, екоаналітична хімія. Ступінь впровадження: Матеріал дисертаційної роботи включено до курсу лекцій зі спеціальності, який читається для аспірантів ІХП ім. О.О.Чуйка НАН України.

2. Objects of investigation: hybrid organic-inorganic materials represented by such classes as functionalized polysiloxane and polysilsesquioxane xerogels and mesoporous silicas. Purposes of the work: The goal of this dissertation was studying the influence of the nature of initial components and synthesis conditions of sol-gel and template methods on the basic physical, chemical, and structural-adsorption characteristics of hybrid organic-inorganic materials; the elaboration of directed routes of synthesis of polysiloxane and polysilsesquioxane xerogels and mesoporous silicas with mono-, bi- or threefunctional surface layer with nitrogen, phosphorus-, oxygen- and sulfurcontaining functional groups. Methods and apparatus: Quantum-chemical and a number of physical methods: thermal and X-ray diffraction analysis, SEM, TEM and AFM, Infrared and Raman Spectroscopy, solid-state NMR Spectroscopy, Electron Reflection Spectroscopy, metal probe method in EPR spectral version, and adsorption method. Theoretical and practical results: A general approach to the synthesis of polysiloxane and polysilsesquioxane xerogels and mesoporous silicas and with polyfunctional surface layer containing complexing groups was developed. The established dependencies open new ways of synthesis of novel hybrid organic-inorganic materials, including sorbents with programmed basic characteristics. Obtained sorbents are promising for selective extraction and concentration of heavy metals, including precious, and also Lanthanide and Actinide from their technological solutions. Novelty: The methods of synthesis of polysiloxane and polysilsesquioxane xerogels functionalized by amino, thiol, (thio)urea, carboxyl and (thio)phosphoryl groups were developed. The influence of reacting aloxysilanes' nature and the synthesis conditions on structural and adsorptive properties of xerogels with monofunctional layer was determined. The methods of synthesis of xerogels with bifunctional surface layer that contains a combination of different functional groups were also developed. The template method of synthesis of mesoporous silicas with mono-, bi-, and and threefunctional surface layer characterized by high surface area values (1000 - 1300 m<sup>2</sup>/g) and high content of complexing groups (up to 2 mmol/g) was developed. The application of a number of physical methods gave understanding of surface structure of hybrid organic-inorganic materials. We determined the high sorption capacity of synthesized materials to ions of heavy metals, lanthanides, and uranyl-ion. The main rules and basic scientific principles of directed synthesis of hybrid organic-inorganic sorption materials were formulated. The degree of application: Sorption technologies, catalysis, biosensors, ecoanalytical chemistry. Application field: Materials of the dissertation are included in the lecture course in the specialty, attended by the graduate students of Chuiko Institute of Surface Chemistry of NAS of Ukraine.

**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)**

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

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Стрелко Володимир Васильович

2. Стрелко Володимир Васильович

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.11

**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. Коробов Олександр Ісаакович

2. Коробов Олександр Ісаакович

**Кваліфікація:** д.х.н., 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. Калібабчук Валентина Олександрівна

2. Калібабчук Валентина Олександрівна

**Кваліфікація:** д.х.н., 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

**Рецензенти**

## **VIII. Заключні відомості**

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

Орлов Валерій Дмитрович

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

Орлов Валерій Дмитрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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

Юрченко Т.А.

