Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0410U003332

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-05-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Смірнова Олеся Валентинівна
2. Smirnova Olesia Valentinovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 13-05-2010

Спеціальність за освітою: 7.07.03.01

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.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: 31.15.35

Тема дисертації:

1. Вплив природи адсорбата та розчинника на взаємодію феноксикарбонових кислот з поверхнею нанодисперсного кремнезему

2. Influence of the nature of adsorbate and solvent on interaction of phenoxycarboxylic acids with the silica surface

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню особливостей впливу природи розчинника та модифікування поверхні кремнезему (гексаметилдісилазаном) на адсорбцію оксикарбонових кислот. За допомогою квантово-хімічних розрахунків встановлена кореляція між сорбційними та сольватаційними ефектами. Вперше показано, що полярність розчинника та його електронодонорна здатність визначають величини вільної енергії Гібса адсорбції карбонових кислот. Проведено порівняння величин адсорбції та десорбції оксикарбонових кислот і встановлена їх залежність від ступеня модифікування поверхні кремнезему. Запропоновано механізм адсорбції оксикарбонових кислот на поверхні кремнезему. З'ясовано, що з поверхневими центрами карбонові кислоти реагують як по гідрофільному, так і по гідрофобному механізмах. Вперше встановлена залежність адсорбції оксикоричних кислот та пирокатехіну від pKa на метильованій поверхні кремнезему. Встановлено структури адсорбційних комплексів на поверхні кремнезему для

ассоційованих кислот.

2. The influence of the nature of solvent and silica surface modification (using hexamethyl disilazane) on adsorption of oxycarboxylic acids has been studied. Using quantum-chemical calculations the relationship between adsorption and salvation effects was detected. For the first time it was shown that polarity and electron-donating ability of a solvent determine the magnitudes of Gibbs free energy and adsorption of oxycarboxylic acids. The dependencies of adsorption and desorption of oxycarboxylic acids on degree of surface modification were determined. The mechanism of adsorption of oxycarboxylic acids on silica surface was supposed. It was established that carboxylic acids react with surface sites via both hydrophylic and hydrophobic mechanisms. For the first time the dependency of adsorption of hydroxy-cinnamic acids and pyrocatechol on pKa on methylated silica surfaces was measured. The structure of adsorption complexes on silica surfaces for the self-associated acids was established.

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)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Погорєлий Валерій Костянтинович
2. Pogorelyi Valerij Konstantinovich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тьортих Валентин Анатолійович

2. Тьортих Валентин Анатолійович

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

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. Манк Валерій Веніамінович

2. Манк Валерій Веніамінович

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 Гунько Володимир Мусійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Гунько Володимир Мусійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.