Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0502U000069

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-03-2002

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голуб Олександр Андрійович
2. Golub Oleksandr Andrijovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 25-02-2002

Спеціальність за освітою: 01.08

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.03

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.29, 31.17.01

Тема дисертації:

1. Структурні особливості комплексоутворення на поверхні.

2. . Structural features of complex formation at surface.

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню впливу прищеплення до поверхні, структури поверхні та лігандного шару на протолітичні і координаційні рівноваги, а також на будову утворюваних координаційних сполук. На прикладі великого числа вперше синтезованих координаційних сполук перехідних металів з іммобілізованими на поверхні аеросилу фосфатними, тіофосфатними, бі- та амполідентатними азометиновими лігандами демонструються можливості застосування молекулярного моделювання (методи молекулярної механіки, квантової хімії, математичної статистики) для прогнозування складу та будови прищеплених комплексів, а також сорбційних властивостей адсорбентів. Розглядаються можливості застосування синтезованих сполук як каталізаторів та селективних сенсорів.

2. The thesis is devoted to investigation of anchoring to surface, ligands layer and surface structure influence on protolytic and complex formation equilibrium so as on formed coordination compounds structure. By means of

formal thermodynamics it is shown that the reactions of the complex formation, which proceed on a silica surface have a number of distinctive features in comparison with similar reactions in solutions. Among them we can mention (i) the simultaneous formation of several kinds of superficial compounds, (ii) the lowering of basicity of immobilised ligands in comparing with free ones, (iii) the dependence of the stability of complexes on the degree of completeness of the reaction, as well as on the topology of immobilized ligands, (iv) the influence of excess of free electrostatic energy of a surface as a result of electric double layer formation and so on. One of the main factors, influencing complex formation is the structure of ligand cover, namely, arrangement and donor centers structu ral features. It is shown that major and frequently unique information may give molecular modeling (MM) of superficial ligands and their complexes. In difference from similar systems in solutions the application of theoretical methods for studying of coordination compounds at the solid surface seems to be especially attractive because of the rigidity of the support for this reduce the number of freedom degrees of the molecules and the number of spatial configurations to be analyzed. In thesis by meens of MM is shown an impossibility of hydrogen bonding formation between amino groups themselves and amino groups and silanols at plane regular aminopropylaerosil surface. In frames of simple geometrical model the peculiarities of chemosorbed molecules concentration dependence from their size, specific surface area and spacer length have been determined. Obtained analytical correlation permit to forecast a nonlinearity in the dependence between adsorbed molecules concentration and specific surface area which can e xceed 20% at 1.7 times surface area changing, and allow ligands effective size to be estimated from experimental data for similar molecules at adsorbent surfaces of different surface area. In thesis the possibilities of mathematical statistic methods for prediction of adsorption properties of complexing sorbents is discussed. As shown by the computational methods at the surface of nonporous silica metal-ions can bind only one structural silanol group. The complexes are bond with isolated silanols irrespective of the way of synthesis, - as in the case of ion exchange, by reaction of impregnation with salt solutions and the subsequent thermal decomposition. The formation regularity of metal oxide surface layer at aerosil is analysed. For silica, containing anchored phosphate or tiophosphate groups connected with a surface through silanols, molecular mechanic and the quantum chemistry predict primary stability of complexes of a structure 1:1 in the case of bidentate linkage with a metal.

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. 1

2. 1

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. Стрелко Володимир Васильович

2. Стрелко Володимир Васильович

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. Калібабчук Валентина Олександрівна

2. Калібабчук Валентина Олександрівна

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. Манорик Петро Андрійович
2. Манорик Петро Андрійович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради — Слободяник Микола Семенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Слободяник Микола Семенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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