Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U005868

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-10-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Войтко Катерина Василівна

2. Voitko Kateryna Vasylivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 13-10-2011

Спеціальність за освітою: 7.070300

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: 31.15.27.07

Тема дисертації:

1. Каталазоподібні властивості нанопоруватих та нанорозмірних вуглецевих матеріалів.

2. Catalase-like properties of nanoporous and nanoscale carbon materials.

Реферат/анотація:

1. Досліджено вплив структурних характеристик та хімії поверхні природних і синтетичних нанопоруватих (активне вугілля) та нанорозмірних (вуглецеві нанотрубки, оксиди графену) вуглецевих матеріалів на їхні каталітичні (каталазоподібні) властивості. Проаналізовано вплив зміни зовнішніх факторів (концентрація H_2O_2, pH, температура) на каталітичну здатність вуглецевих матеріалів в реакції розкладання пероксиду водню. Оптимізовано методику дослідження каталазоподібних властивостей нанорозмірних вуглецевих матеріалів і застосовано закони ферментативної кінетики для описання та порівняння їх каталітичної здатності з активністю ферменту каталази. Кількісно оцінено вплив дифузійної та хімічної складових на ефективність дії каталізаторів на основі активного вугілля. З використанням теорій Тіле-Зельдовича і осциляційної проведено кореляційний аналіз між реакційною здатністю, дифузією та структурними характеристиками носіїв, розраховано ефективні коефіцієнти дифузії молекули H_2O_2. Показано, що дифузія не є визначальним фактором у каталітичній активності досліджуваних матеріалів. Для підвищення активності зразків вуглецевих матеріалів здійснено модифікування їх поверхні кисне- та азотовмісними

функціональними групами та ферментом каталаза. За допомогою методів РФЕС та ТПД МС, і кількісного елементного аналізу встановлено будову функціональних груп вуглецевих матеріалів. Встановлені кореляції між структурою вуглецевих матриць, зміною їх хімії поверхні та каталазоподібними властивостями. На основі отриманих залежностей запропоновано ряди активності досліджуваних зразків. Експериментально доведено, що модифікування кисневмісними функціональними групами поверхні активного вугілля знижує його каталітичну здатність, тоді як для зразків вуглецевих нанотрубок спостерігається її підвищення. Введення гетероатомів азоту підвищує каталітичні властивості активного вугілля та вуглецевих нанотрубок. Доведено, що видалення кисневмісних функціональних груп та модифікування гетероатомами азоту вихідних зразків оксидів графену призводить до погіршення їхньої каталітичної здатності. Визначено закономірність впливу електронної будови модельних нанокластерів вуглецевих матеріалів (C43O3H16, C42H16 та C40N2H16) на їх каталітичну активність в реакції розкладання пероксиду водню.

2. The influence of structural characteristics and surface chemistry of natural and synthetic nanoporous (activated carbon) and nanoscale (carbon nanotubes, graphene oxide) carbon materials on their catalytic (catalase-like) properties was investigated. Effect of changing external factors (H2O2 concentration, pH, temperature) on the catalytic ability of carbon materials in the hydrogen peroxide decomposition reaction has been analyzed. The laws of enzyme kinetics have been applied for describing and comparing catalytic activity of carbon materials with the activity of the enzyme catalase. The influence of diffusion and chemical components of the activated carbon on it's catalytic activity was quantitatively estimated. Using Thiele-Zeldovich and oscillation theories correlation analysis between reactivity, diffusion and structural characteristics of catalysts has been done, the effective diffusion coefficients of molecules of H2O2 were calculated. It was shown that diffusion is not a determining factor in the catalytic activity of carbon materials. For increasing of the samples activity their surface was modified by oxygen- and nitrogen-containing functional groups and the enzyme catalase. The structure of functional groups of carbon materials has been determined using XPS and TPD MS methods and quantitative elemental analysis. Correlation between the structure of carbon matrix, changing their surface chemistry and catalase-like properties was established and based on these correlation rows of samples activity were proposed. Experimentally proved that the modification of active carbon's surface by oxygen-containing groups reduces its catalytic ability, whereas activity of oxidized carbon nanotubes is increasing. Modification by nitrogen heteroatoms leads to increasing of the catalytic properties of activated carbon and carbon nanotubes. It has been proved that the removal of oxygen-containing functional groups and modifying by nitrogen heteroatoms leads to decreasing of graphene oxide catalytic properties. The regularities of the influence of the electronic structure of the carbon materials model nanoclusters (C43O3H16, C42H16 and C40N2H16) on their catalytic activity in the decomposition of hydrogen peroxide have been determined.

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. Картель Микола Тимофійович

2. Kartel Mykola Tymofiyovych

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. Туров Володимир Всеволодович

2. Туров Володимир Всеволодович

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. Пузій Олександр Михайлович

2. Пузій Олександр Михайлович

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. Каздобін Костянтин Олександрович

2. Каздобін Костянтин Олександрович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.05

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.