

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0523U100032

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-03-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Киця Андрій Романович

2. Kytsya Andriy R.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

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: 02-03-2023

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03772476

Місцезнаходження: вул. Наукова, буд. 3-а, м. Львів, Львівська обл., 79053, Україна

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 35.051.10

**Повне найменування юридичної особи:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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:** Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглекислоти ім. Л.М. Литвиненка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03772476

**Місцезнаходження:** вул. Наукова, буд. 3-а, м. Львів, Львівська обл., 79053, Україна

**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. Кінетика формування Ag-, Cu- та Ni-вмісних наночастинок у розчинах
2. Kinetics of the formation of Ag-, Cu- and Ni-containing nanoparticles in solutions

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню кінетичних та термодинамічних закономірностей формування моно- та біметалевих наночастинок з метою встановлення механізмів їх формування. На основі порівняння результатів комплексного експериментального дослідження кінетики формування наночастинок срібла, міді та нікелю в розчинах за умов їх гомогенної нуклеації проведено порівняльний аналіз можливості використання різних варіантів псевдо-гомогенних кінетичних схем Фінке-Ватзкі для опису процесів нуклеації, росту та агрегації частинок. Вперше виявлені кореляції між спостережуваними константами швидкостей нуклеації, росту та агрегації і полідисперсністю отримуваних наночастинок. На основі співставлення активаційних параметрів нуклеації і росту наночастинок з редокс-потенціалами відповідних металів показано, що зародження нової фази лімітується хімічним процесом відновлення іонів металів. Вперше проведено молекулярне моделювання елементарних стадій утворення кластеру Ag<sub>4</sub> і встановлено, що термодинамічна ймовірність ступеневого формування критичного зародка срібла шляхом приєднання

іона срібла до зростаючого незарядженого кластера з подальшим відновленням поліатомного катіона  $\text{Ag}_n^+$  є вищою порівняно з асоціацією незаряджених атомів  $\text{Ag}^0$ . Запропонована кінетична модель формування наночастинок металів за умов їх гомогенної нуклеації, яка враховує стадію утворення зародків і на її основі вперше виведені рівняння для розрахунку концентрації утворюваних частинок та їх розмірів за значеннями спостережуваних констант швидкостей нуклеації і росту. На основі детального аналізу кінетичних закономірностей відновлення  $\text{Ag}^+$  гідрaziном у водних розчинах запропоновано механізм росту  $\text{AgNPs}$  та розраховані константи швидкостей елементарних стадій процесу. Вперше досліджена кінетика формування наночастинок нікелю відновленням  $\text{Ni}(\text{OH})_2$  гідрaziном у розчинах етиленгліколю і запропонований механізм формування наночастинок нікелю в гетерогенних системах. Досліджена кінетика формування біметалевих наночастинок  $\text{Ni-Co}$  і показано, що швидкість нуклеації  $\text{Ni-Co-NPs}$  визначається концентрацією  $\text{Ni}(\text{OH})_2$ , а швидкість росту – концентрацією  $\text{Co}(\text{OH})_2$ . Досліджена кінетика контактного відновлення іонів срібла на поверхні  $\text{NiNPs}$  і запропонована кінетична модель процесу. Встановлено, що моно- та біметалеві наночастинок на основі нікелю є здатними до електрохімічного наводнення та демонструють суттєву розрядну ємність. Досліджено каталітичну активність  $\text{Ni-Co-NPs}$  в процесі генерування водню гідролізом  $\text{NaBH}_4$ . Досліджена антимікробна активність  $\text{AgNPs}$ . Показано перспективність застосування моно- та біметалевих наносистем як додатків до мастильних середовищ.

2. The dissertation is devoted to the investigation of kinetics and thermodynamics of the formation of mono- and bimetallic nanoparticles with the aim of establishing the mechanisms of their formation. Based on the comparison of the results of a complex experimental study of the kinetics of the formation of silver, copper and nickel nanoparticles in solutions under the conditions of their homogeneous nucleation, a comparative analysis of the possibility of using different versions of pseudo-homogeneous Finke-Watzky kinetic schemes to describe the processes of particle nucleation, growth and aggregation was carried out. The correlations between the observable rate constants of nucleation, growth, and aggregation and the polydispersity of the obtained nanoparticles were revealed. Based on the comparison of the activation parameters of nucleation and growth of nanoparticles with the redox potentials of the corresponding metals it is shown that the nucleation of a new phase is limited by the chemical process of reduction of metal ions. The molecular modeling of the elementary stages of  $\text{Ag}_4$  cluster formation was carried out and it was established that the thermodynamic probability of stepwise formation of a critical nucleus of silver by the joining a silver ion to a growing uncharged cluster with subsequent reduction of the polyatomic cation  $\text{Ag}_n^+$  is higher compared to the association of uncharged  $\text{Ag}^0$  atoms. A kinetic model of the formation of metal nanoparticles under the conditions of their homogeneous nucleation is proposed and the equations for calculation the concentration of the formed particles and their sizes are derived. Based on a detailed analysis of the kinetics of  $\text{Ag}^+$  reduction by hydrazine in aqueous solutions the mechanism of growth of  $\text{AgNPs}$  is proposed and the rate constants of the elementary stages of the process are calculated. The kinetics of the formation of nickel nanoparticles by the reduction of  $\text{Ni}(\text{OH})_2$  with hydrazine in ethylene glycol solutions was investigated and the mechanism of the formation of  $\text{NiNPs}$  in heterogeneous systems was proposed. The kinetics of the formation of  $\text{Ni-Co}$  bimetallic nanoparticles was studied and it was shown that the rate of nucleation of  $\text{Ni-Co-NPs}$  is determined by the concentration of  $\text{Ni}(\text{OH})_2$ , and the rate of growth is determined by the concentration of  $\text{Co}(\text{OH})_2$ . The kinetics of cementation of silver ions on the surface of  $\text{NiNPs}$  was investigated and a kinetic model of the process was proposed. It has been established that mono- and bimetallic nanoparticles based on nickel are capable of electrochemical hydrogenation and exhibit significant discharge capacity. The catalytic activity of  $\text{Ni-Co-NPs}$  in the process of hydrogen generation by hydrolysis of  $\text{NaBH}_4$  was shown. The antimicrobial activity of  $\text{AgNPs}$  was studied. The promising application of mono- and bimetallic nanosystems as additives to the lubricants is shown.

**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)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Киця Андрій Романович

2. Kytsya Andriy R.

**Кваліфікація:** к. 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. Киця Андрій Романович

2. Kytsya Andriy R.

**Кваліфікація:** к. 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. Аксіментьева Олена Ігорівна
2. Aksimentyeva Olena Ihorivna

**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. Василечко Леонід Орестович
2. Vasylechko Leonid Orestovych

**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. Стрижак Петро Євгенович
2. Strizhak Petr Evgenovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.15

**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**

Павлюк Володимир Васильович

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

Павлюк Володимир Васильович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.