Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0400U000490

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-04-2000

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коняєв Дмитро Сергійович
2. Konyayev Dmytro Sergijovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат 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: 14-01-2000

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

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 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: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.25

Тема дисертації:

1. Методи аналізу даних і хімічної інформатики у дослідженні комплексоутвореннння у розчинах і на поверхні хімічно модифікованих кремнеземів

2. Methods of data analysis and chemical informatics for investigating complex formation in solutions and on a surface of chemically modified silicas

Реферат:

1. Протолітичні рівноваги та рівноваги комплексоутворення на поверхні комплексоутворюючих хімічно модифікованих кремнеземів (КХМК), методи теорії аналізу даних. Розробка, комп'ютерна реалізація та випробування методів теорії аналізу даних у дослідженні комплексоутворення у розчинах і на поверхні КХМК. Методи дослідження: методи теорії аналізу даних і інформатики, математичне моделювання. Розроблено чисельно стійкі і робастні алгоритми для визначення констант стійкості і факторів інтенсивності комплексів; доведено переваги робастних оцінок і нововжитих засобів аналізу даних над стандартними статистичними методами; створено базу даних з властивостей КХМК; розроблено алгоритм розмитої класифікації даних з пропусками про властивості речовин і матеріалів; запропоновано автоматизовану систему для опису фізико-хімічних властивостей КХМК; за даними методів спектрофотометрії, pH-метрії, розчинності знайдено моделі, що описують рівноваги різних типів у розчинах та на поверхні декількох

зразків КХМК; одержано змістовну інформацію про фізико-хімічні властивості амінокремнеземів, вплив розчинників на стійкість металокмплексів, закріплених на поверхні кремнеземів, тощо. Сфера використання: кількісний фізико-хімічний аналіз, координаційна хімія та хімія поверхні.

2. Protolytic and complexation equilibria on the surfaces of complexing chemically modified silicas (CCMS), methods of data analysis theory. Development, computer implementation and test of methods of data analysis theory and chemical informatics as applied to investigating complexation in solutions and on surfaces of CCMS. The methods of research are the methods of data analysis theory and mathematical simulation. The numerically stable and robust algorithms for the determination of stability constants and intensity factors of complexes have been proposed. The advantages of robust estimates and novel tools of data analysis in comparison with common statistical procedures have been shown. Models of equilibria in solutions and on surfaces of some specimens of CMCS were found on the base of data obtained by methods of spectrophotometry, pH-metric titration and solubility. The data base containing information on the properties of CMCS was constructed, the method for fuzzy classification of incomplete data about properties of substances and materials was proposed. The automatic system for the description of physico-chemical properties of CMCS was created. The use of the system gave the meaningful information about physico-chemical properties of aminosilicas and the influence of solvents on stability constants of metal complexes fixed on silica surfaces. The fields of usage are quantitative physicochemical analysis, coordination and surface chemistry.

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. Холін Ю.В.

2. Холін Ю.В.

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. В'юник І.М.
2. В'юник І.М.

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. Бударін В.Л.
2. Бударін В.Л.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Орлов В.Д.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов В.Д.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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