Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002785

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-07-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ № 77/12 від 30.09.2024

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кордиш Олексій Миколайович
2. Oleksii Kordysh

Кваліфікація: молодший науковий співробітник

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9215-3869

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Хімія

Дата захисту: 12-09-2024

Спеціальність за освітою: Хімічні технології та інженерія

Місце роботи здобувача: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 11.051.077

Повне найменування юридичної особи: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.25.09, 31.17.15.19, 31.19.15, 29.19.19

Тема дисертації:

1. Полівольфрамати двозарядних катіонів s- та d- металів

2. Polytungstates of doubly-charged s- and d- metals' cations

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена комплексному дослідженню рівноваг у водних розчинах вольфраму (VI) в присутності двозарядних катіонів s- та d-металів (барію, стронцію, кальцію, кадмію), визначенню термодинамічних характеристик цих рівноваг, розробці умов синтезу та визначенню будови паравольфраматів кальцію, стронцію, барію та кадмію. У розділі 1 проаналізовано методи та історію досліджень стану аніонів вольфраму (VI) у водних розчинах, процеси поліконденсації WO_4^{2-} з утворенням ІПВА. Розглянуто методики синтезу, будову і властивості вже відомих ізополівольфраматів двозарядних катіонів s- та d-металів. У розділі 2 наведено методики стандартизації вихідних речовин, фізичні методи дослідження стану аніонів вольфраму (VI) у розчині, методику моделювання за програмою CLINP 2.1, метод Пітцера, методики синтезу та аналізу складу і будови синтезованих солей. У розділі 3 проведено pH-потенціометричні дослідження процесів поліконденсації W(VI) з утворенням іонних асоціатів між ІПВА та M^{2+}(M = Ba, Cd, Ca, Sr) у розчинах. Методом кондуктометричного титрування встановлено утворення іонних асоціатів зі співвідношенням 1:1 між паравольфрамат або гексавольфрамат аніоном та двозарядними

катіонами. За результатами pH-потенціометрії методом quasiNewton за програмою CLINP 2.1 проведено математичне моделювання рівноважних процесів поліконденсації, які відбуваються зі зміною кислотності розчину. Вперше показано, що в підкислених розчинах ортовольфрамату за присутності двозарядних катіонів M2+(M = Ba, Cd, Ca, Sr) утворюються іонні пари між цими катіонами та ІПВА і у широкому діапазоні кислотності (Z = 1,00 : 1,42) існують протоновані форми паравольфрамат Б аніонів. За запропонованими моделями розраховано логарифми концентраційних констант утворення іонних пар і показано їх залежність від pH розчину, концентрації речовин, та природи фонового електроліту. Методом Пітцера вперше визначено термодинамічні константи утворення іонних пар, розраховано енергії Гіббса реакцій утворення іонних пар з мономерних іонів та стандартні енергії Гіббса утворення іонних пар, які можуть бути включені до баз термодинамічних величин та використані при моделюванні інших рівноваг і механізмів реакцій поліконденсації та при розробці оптимальних методик синтезу ізополівольфраматів. У розділі 4 на основі дослідження умов перебігу реакцій поліконденсації та утворення іонних асоціатів було розроблено нові експресні та менш енергозатратні методики синтезу барію, кадмію, стронцію та кальцію паравольфраматів. За новими методиками синтезовано 7 нових солей паравольфраматів: Ba5[W12O40(OH)2]·30H2O, Ba4Na2[W12O40(OH)2]·25H2O, Ba2Na4H2[W12O40(OH)2]·28H2O, Cd2Na6[W12O40(OH)2]·25H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·33H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·38H2O, Sr4.5Na0.5H0.5[W12O40(OH)2]·30.5H2O та 4 вже відомих Ca5[W12O40(OH)2]·30H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·30H2O, Sr4Na2[W12O40(OH)2]·30H2O, Sr4.5H[W12O40(OH)2]·30H2O. Молекулярні формули визначено за допомогою методів хімічного елементного аналізу, атомно-абсорбційної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії. Паравольфрамат Б аніони ідентифіковано за ІЧ та Раман спектрами. Методом скануючої електронної спектроскопії досліджено морфологію, однорідність та однофазність поверхні солей. Методом рентгеноструктурного аналізу вперше охарактеризовано кристалічну структуру солей Ca5[W12O40(OH)2]·30H2O та Sr4.5Na0.5H0.5[W12O40(OH)2]·30.5H2O. Результати рентгеноструктурних досліджень депонуються для розміщення в Кембриджському центрі кристалографічних даних (CCDC).

2. The dissertation is dedicated to the comprehensive study of equilibria in aqueous solutions of tungsten (VI) in the presence of doubly-charged cations of s- and d-metals (barium, strontium, calcium, cadmium), determination of the thermodynamic characteristics of these equilibria, development of synthesis conditions, and determination of the structure of calcium, strontium, barium, and cadmium paratungstates. In Chapter 1, the methods and history of research on the state of tungsten (VI) anions in aqueous solutions, the polycondensation processes of WO42– with the formation of IPTA are analyzed. The synthesis methods, structure, and properties of the already known isopoly tungstates of doubly-charged cations of s- and d-metals are considered. In Chapter 2, the methods for standardizing starting substances, physical methods for studying the state of tungsten (VI) anions in solution, the CLINP 2.1 modeling program, the Pitzer method, and the synthesis techniques, as well as the analysis of the composition and structure of the synthesized salts, are described. In Chapter 3, pH-potentiometric studies of the polycondensation processes of W(VI) with the formation of ionic associates between IPTA and M2+ (M = Ba, Cd, Ca, Sr) in solutions are conducted. The formation of ionic associates with a 1:1 ratio between paratungstate or hexatungstate anion and doubly-charged cations is established by conductometric titration. Based on the results of pH-potentiometry using the quasi-Newton method and the CLINP 2.1 program, mathematical modeling of equilibrium polycondensation processes occurring with changes in the solution's acidity is carried out. For the first time, it is shown that in acidified orthotungstate solutions in the presence of doubly-charged cations M2+ (M = Ba, Cd, Ca, Sr), ion pairs are formed between these cations and IPTA, and protonated forms of paratungstate B anions exist over a wide acidity range (Z = 1.00 : 1.42). The logarithms of concentration constants for ion pair formation are calculated based on the proposed models, and their dependence on the solution's pH, substance concentration, and the nature of the background electrolyte is shown. For the first time, thermodynamic constants for ion pair formation are determined using the Pitzer method, Gibbs energies of ion pair formation reactions from monomeric ions, and standard Gibbs energies of ion pair formation are calculated, which can be included in thermodynamic databases and used in modeling other equilibria and polycondensation reaction mechanisms, as well as in developing optimal synthesis methods for isopoly tungstates. In Chapter 4, based on the study of

polycondensation reaction conditions and ion association formation, new rapid and less energy-consuming synthesis methods for barium, cadmium, strontium, and calcium paratungstates were developed. Seven new paratungstate salts were synthesized using the new methods: Ba5[W12O40(OH)2]·30H2O, Ba4Na2[W12O40(OH)2]·25H2O, Ba2Na4H2[W12O40(OH)2]·28H2O, Cd2Na6[W12O40(OH)2]·25H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·33H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·38H2O, Sr4.5Na0.5H0.5[W12O40(OH)2]·30.5H2O, and four previously known ones: Ca5[W12O40(OH)2]·30H2O, Ca2Na6[W12O40(OH)2]·30H2O, Sr4Na2[W12O40(OH)2]·30H2O, Sr4.5H[W12O40(OH)2]·30H2O. Molecular formulas were determined using chemical elemental analysis methods, atomic absorption spectroscopy, and energy dispersive X-ray spectroscopy. Paratungstate B anions were identified by IR and Raman spectra. The morphology, uniformity, and single-phase surface of the salts were studied by scanning electron spectroscopy. For the first time, the crystal structure of the salts Ca5[W12O40(OH)2]·30H2O and Sr4.5Na0.5H0.5[W12O40(OH)2]·30.5H2O was characterized by X-ray diffraction analysis. The results of X-ray structural studies are deposited for placement in the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC).

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Наукові праці, в яких опубліковані основні результати дисертації:
- 1. Kordysh OM, Duvanova ES, Knyzhnyk IA, et al (2022) Modeling of equilibria in an acidified solution of sodium orthotungstate in the presence of barium(II) ions. Vopr Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii 39–48. (Q3), https://doi.org/10.32434/0321-4095-2022-145-6-39-48
- 2. Kordysh OM, Knyzhnyk IA, Radio SV, Rozantsev GM (2024) Modeling of equilibria in acidified solutions of sodium orthotungstate in the presence of calcium(II) ions. Vopr Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii 37–47, https://doi.org/10.32434/0321-4095-2024-152-1-37-47
- Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:
- 3. Дремлюга А. В., Дуванова Е. С., Кордиш О. М., Радіо С. В., Розанцев Г. М. Синтез паравольфрамату Б-кадмію. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2021. 224 с.
- 4. Дуванова Е.С., Рисіч А.В., Кордиш О. М., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Ізополівольфрамат-аніони у складі йонних пар за низької кислотності. Збірник наукових праць: XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2021». Львів, 31 травня – 2 червня 2021 року – Львів: Видавництво від А до Я, 2021. – 260 с.
- 5. Цабак Н. Г., Кордиш О. М., Дуванова Е. С., Книжник І. А., Радіо С. В., Розанцев Г. М. Взаємодія катіонів кальцію з ортовольфрамат-аніонами при Z = 1,00–1,50. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2023): збірник тез доповідей VI Міжнародної (XVI Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 21–23 березня 2023 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2023. 148 с.
- 6. Книжник І. А., Кордиш О. М., Дуванова Е. С., Радіо С. В., Розанцев Г. М. Дослідження рівноваг утворення поліоксовольфраматів барію в підкислених розчинах ортовольфрамату натрію та їх виділення у твердій фазі. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2023): збірник тез доповідей VI Міжнародної (XVI Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 21–23 березня 2023 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М.

Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2023. 148 с.

- 7. Цабак Н.Г., Кордиш О.М., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Поліоксовольфрамати стронцію в підкислених розчинах і твердій фазі. Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (19 квітня 2023 року). Матеріали конференції. – Житомир: ПП «Євро-Волинь», 2023. – 288 с., іл.
- 8. Kordysh, O. M., Knyzhnyk, I. A., & Rozantsev, G. M. Modeling of Equilibria in an acidified solution of sodium orthotungstate in the presence of calcium(II) Ions. International scientific-practical conference “Current issues of science, education and society: theory and practice”: conference proceedings (Aarhus, Denmark, October 20, 2023). Aarhus, Denmark: Scholarly Publisher ICSSH, 2023. 79 pages.
- 9. Oleksii Kordysh, Ivan Knyzhnyk, Sergii Radio, Georgii Rozantsev. Modeling of equilibria in an acidified solution of sodium orthotungstate in the presence of barium(II) ions. The 12th International scientific and practical conference “Innovations and prospects in modern science” (November 20-22, 2023) SSPG Publish, Stockholm, Sweden. 2023. 912 p.
- 10. Oleksii Kordysh, Ivan Knyzhnyk, Georgii Rozantsev. Modeling of equilibria in the acidified solutions of sodium orthotungstate in the presence of strontium cations. Book of abstracts of XXI International Conference on Inorganic Chemistry Ukraine (XXI ICICU) (Uzhhorod 2024, June 3-6). Uzhhorod: Publishing House of UzhNU «Hoverla» 2024. 164 p. ISBN 978-617-8321-25-3.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали; методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту; економія енергоресурсів; економія матеріалів

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: №0119U100025 №0122U000762

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Розанцев Георгій Михайлович

2. Georgiy Rozantsev

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7991-4774

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603343359

Повне найменування юридичної особи: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Неділько Сергій Андрійович

2. Sergiy Nedilko

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8946-7915

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6604039050

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Юрій Іванович

2. Yurii Slyvka

Кваліфікація: д. х. н., доцент, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2751-2543

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7801691096

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Штеменко Олександр Васильович

2. Olexandr Shtemenko

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5588-0901

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36963886500

Повне найменування юридичної особи: Український державний університет науки і технологій

Код за ЄДРПОУ: 44165850

Місцезнаходження: вул. Лазаряна, буд. 2, Дніпро, Дніпровський р-н., 49010, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гетьман Євген Іванович

2. Yevhen Hetman

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7665-556X

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602738183

Повне найменування юридичної особи: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Шендрик Олександр Миколайович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Шендрик Олександр Миколайович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Солобут Ольга Сергіївна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна