Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U003809

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-10-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кравченко Андрій Анатолійович
2. Kravchenko Andrii Anatoliyovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 21-09-2017

Спеціальність за освітою: 7.080101

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): 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: 31.15.37

Тема дисертації:

1. Теоретичне моделювання взаємодії поверхні наночастинок кремнезему з водними розчинами електролітів
2. Theoretical simulation of interaction of surface nanoparticular silica with aqueous solution of electrolytes

Реферат:

1. Знайдено рівноважну будову відповідних адсорбційних комплексів, а також структури активаційних комплексів, які утворюються при переходах між молекулярним станом та станом з просторово розділеними зарядами, що дозволило визначити енергії депротонування силанольної групи поверхні не лише з урахуванням енергії, витраченої на руйнування зв'язку ?Si-OH, а й взяти до уваги енергію гідратації протона. У межах розвинутої моделі показано, що адсорбція деяких катіонов лужних металів на поверхні кремнезему відбувається переважно на депротонованих силанольних групах в результаті іонного обміну. При цьому відбувається зсув протолітичної рівноваги поверхневих груп. Розрахунки свідчать про утворення катіонної форми силанольної групи при контакті поверхні кремнезему з кислим середовищем. Коефіцієнт її депротонування визначається природою аніона та зростає за абсолютною величиною при збільшенні його радіуса. Запропонована модель дозволяє розрахувати значення точки нульового заряду поверхні кремнезему в присутності на ній адсорбційних комплексів різної природи. В рамках узагальненої моделі гідратованих адсорбційних комплексів сполук лужних металів у молекулярному стані та стані з розділеними зарядами за

участі молекул H2O та силанольних груп поверхні кремнезему розраховане значення pKMe, яке збільшується в ряду Li<Na<K, що відповідає експериментальним даним.

2. The equilibrium spatial structures have been found of respective adsorption complexes as well as those of the activated complexes formed due to transitions between the molecular states and charge-separated ones what gives an opportunity to evaluate the deprotonation energy values for surface silanol groups taking into account not only the energy necessary to rupture a Si-OH bond but also the proton hydration one. It has been shown within the frameworks of the model developed that adsorption of cations on silica surface seems to occur preferably on deprotonated silanol groups due to ion exchange. This is accompanied by changes in the protolytic equilibrium of surface groups. The results of calculations testify the formation of a cationic form of silanol group due to contact of silica surface with acidic medium. Relative deprotonation constant is determined by the anion nature and its absolute value increases with an increase in its radius. The model proposed gives a possibility to evaluate the value of zero charge point for silica surface provided it bears adsorption complexes of various nature. Within the frameworks of generalized model for hydrated adsorption complexes of alkali metal compounds in the molecular states and in charge-separated ones involving water molecules and silanol groups of silica surface the pKMe values have been calculated that increase in a row Li<Na<K, what agrees with experimental data. rption on fumed silica corresponds to four-step model, and the pH-dependence of adsorption is determined by the contribution of electrostatic and hydrophobic interactions of BMPA molecules with the sorbent surface. Quercetin and rutin are adsorbed on the fumed silica from organized solutions much more effectively than from aqueous solutions due to the formation of supramolecular complexes (in solution or on the surface), and the pH-dependence of flavonoid adsorption in the composition of these complexes is determined by the sorption properties of individual PVP, HSA and BMPA.

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. Гребенюк Анатолій Георгійович
2. Grebenuk Anatolij

Кваліфікація: к.х.н., 01.04.18, 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. Роженко Олександр Борисович
2. Роженко Олександр Борисович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.08, 02.00.08

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. Голуб Олександр Андрійович
2. Голуб Олександр Андрійович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01, 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	Картель Микола Тимофійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Картель Микола Тимофійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.