Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003857

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-10-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Полтавець Вероніка Володимирівна

2. Poltavets Veronika V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.05

Назва наукової спеціальності: Електрохімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 27-09-2019

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066247

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 08.078.01

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, 8, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, 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: Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066247

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.33

Тема дисертації:

1. Електрохімічне формування та властивості електродних матеріалів на основі MnO2.

2. Electrochemical formation and properties of electrode materials based on MnO2.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню закономірностей анодного окиснення Mn2+-йонів, виявленню чинників впливу на хімічний склад та властивості оксидної плівки MnOx. Квантово-хімічне моделювання електронних переходів в кластерній системі [Mn(H2O)n]z+(H2O)6-n показало, що термодинамічно стійкого формою при z=+2;+3 є гексааквакомплекс мангану, а будь-яка форма при z=+4 є неможливою. Перехід від z=+3 до z=+4 реалізується лише в гідролізованих системах. При збільшенні ступеня гідролізу аквакомплексів Mn3+ стандартний окисно-відновний потенціал переходу Mn3+□ Mn4+ зменшується з 2,90 В для моногідроксидної форми до 1,11 В для тригідроксидної форми. Дегідратація останньої до тетраедрично організованих часток [MnO(OH)(H2O)2] зменшує □0Mn3+/Mn4+ до 0,53 В. Плоскі частки

[MnO(OH)(H2O)2] окиснюються при суттєво більшому потенціалу: □0Mn3+/Mn4+ для них сягає 1,69 В. В октаедричних сульфоаквакомплексах Mn2+ стандартний окисно-відновний потенціал переходу Mn2+□ Mn3+ зменшується відносно однорідних комплексів з 1,56 В до 1,37 В, а в гідрогенсульфокомплексах – до 1,13 В. При цьому термодинамічно можливим стає подальше окиснення комплексів [Mn(SO4) (H2O)5]+ і [Mn(HSO4) (H2O)5]2+, однак воно пов`язано з окисненням аніонів сульфатної кислоти, а не центрального атома. Значний ефект зменшення □0Mn2+/Mn3+ спостерігається в монозаміщених ацетатних і акрилатних октаедричних аквакомплексах мангану: до 0,66 В і 0,64 В відповідно. Встановлено, що окиснювальна здатність оксигеновмісних радикалів–продуктів електроокиснення води, по відношенню до аквакомплексів Mn2+ зростає в ряду : •O•<•OH<• . Високий енергетичний потенціал реакції • +[Mn(H2O)6]2+□ [MnO(H2O)5]+ доповнюється тим, що продукт заміщення молекули води на аніон-радикал миттєво оптимізується в дигідроксид [Mn(OH)2(H2O)4]+ , який, гідролізуючись, легко перетворюється в електроактивний інтермедіат [MnO(OH)(H2O)2]. Співставлення результатів квантово-хімічного моделювання з результатами електрохімічних вимірювань в реальних об`єктах показало, що в залежності від кислотності розчину, складу внутрішньої координаційної сфери аквакомплексів мангану, природи матеріалу електрода та величини анодної поляризації реалізуються різні механізми електроокиснення Mn2+–йонів. В перхлоратних та сульфатних розчинах в області □< □0Mn2+/Mn3+ домінує маршрут: Mn2+ + • □ MnO+ MnO(OH) - е □ MnO2, а в області □> □0Mn2+/Mn3+до нього додається пряме електроокиснення йонів Mn2+. В ацетатних та акрилатних розчинах перебігає лише пряме одноелектронне окиснення комплексів MnL+ с подальшим диспропорціонуванням продукту MnL2+ та гідролізом MnL2+ і кінцевої форми MnL3+ до MnO(OH) і MnO2 відповідно. Фазовий склад та морфологія електролітично виділених плівок MnOx залежить від температури, при якій вони формувались. До t0<500C осад характеризується аморфною структурою, а при t0>500C – є полікристалічним. При зменшенні температури електроосадження змінюється співвідношення форм Mn3+/Mn4+ на користь сполук Mn3+. При 500C спостерігається максимальне розтріскування осаду, поява кристалів субмікронних розмірів. За температур, близьких 800C, формується крупнокристалічних осад. Дериватографічні дослідження підтвердили наявність в електролітичній плівці MnOx сполуки [MnO(OH)(H2O)2]. На прикладі реакції окиснення глюкози показано, що каталітичні властивості плівок MnOx відносно реакцій з переносом оксигену залежать від співвідношення вмісту в них сполук Mn3+ і Mn4+ та досягають максимуму в осаді з x=1,895, що відповідає суміші 21 мол% Mn2O3 і 79 мол% MnO2. Низький потенціал осадження та здатність до полімеризації акрилової кислоти дозволяють наносити з акрилатного електроліту щільні покриття MnOx безпосередньо на сталеву основу. Промислові випробування показали, що система Fe/MnOx здатна витримувати довготривале електричне навантаження в котлах прямого нагріву теплоносія змінним електричним струмом. Ключові слова: анодне окиснення, аквакомплекси мангану, властивості плівок MnOx.

2. The aim of research was to establish the patterns of the anodic oxidation of Mn2+ ions and to identify the factors regulating the chemical composition and properties of the MnOx oxide films. It was shown that, depending on the acidity of the solution, the composition of the internal coordination sphere of manganese aquacomplexes, the nature of the electrode material and the value of the anodic polarization, various mechanisms of electro-oxidation of Mn2+ ions can be implemented. In perchlorate and sulphate solutions in the area of □ < □0Mn2+/Mn3+ the following path prevails: Mn2+ + • □ MnO+ MnO(OH) - e □ MnO2, but in the area □ > □0Mn2+/Mn3+ the path is supplemented with the reaction of direct electrooxidation of Mn2+ ions. In acetate and acrylate solutions only direct electrooxidation of monosubstituted aquacomplexes MnL+ to MnL2+ takes place. The compound MnL2+subsequently disproportionate and simultaneously all products hydrolyze to MnO(OH) and MnO2 The phase composition and morphology of electrolytic MnOx films depends on the temperature of electrolyte. Up to 50 °C, the film has amorphous structure, above 50 °C it has polycrystalline structure. The composition of the main components of the MnOx film has been established: the mixture of MnO(OH)(H2O)2 and MnO2(H2O)2. It has been shown that the catalytic properties of MnOx films toward oxygen-transfer reactions depend on the ratio of Mn3+ and Mn4+ compounds. Maximum catalytic activity was observed at x = 1,895. The possibility of applying high-resistant MnOx films on a steel base and using Fe/ MnOx electrodes in electrical devices based on charge cycling

has been confirmed. Keywords: anodic oxidation, aqua complexes of manganese, properties of MnOx films.

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. Варгалюк Віктор Федорович
2. Vargalyuk Viktor F.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гиренко Дмитро Вадимович
2. Girenko Dmitriy V.

Кваліфікація: к. 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колбасов Геннадій Якович

2. Kolbasov Hennadii Ya.

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	Данилов Фелікс Йосипович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Данилов Фелікс Йосипович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.