Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002552

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-05-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шапошник Анна Миколаївна

2. Shaposhnyk Anna M.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 16-05-2019

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, 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 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: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, 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. Закономірності процесів утворення та структурні особливості оксалатів MC2O4•nH2O (M=Mn,Co,Ni,Cd), форміатів M(HCO2)n (M=Ag,Ni) та продуктів їх термолізу

2. Patterns of formation processes and structural features of oxalates MC2O4•nH2O (M=Mn,Co,Ni,Cd), formates M(HCO2)n (M=Ag,Ni) and products of their thermal decomposition

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню як нових структур так і структурних особливостей уже відомих з літератури гідратів і безводних оксалатів та форміатів перехідних металів за допомогою сучасних методів рентгеноструктурного аналізу з використанням даних растрової електронної мікроскопії та термогравіметричного аналізу. Отримано структурні дані для трьох поліморфних модифікацій дигідрату оксалату марганцю(II) □□, □□ та □-модифікація, що утворюються одночасно при самочинному розпаді кристалів тригідрату оксалату марганцю(II). Дослідженням порошкових зразків дигідратів оксалатів марганцю(II), кобальту(II) та нікелю(II) встановлено, що їх структура є розупорядкованою. Запропоновано модель розупорядкування для розрахунків, яку можна використовувати і для схожих сполук, оскільки існуюча модель OD-структур неприйнятна для використання в методі Рітвельда. За даними порошкових

рентгенограм знайдено нову поліморфну модифікацію безводних оксалатів марганцю(II) та кадмію(II) (□-MnC2O4 та □-CdC2O4), яка утворюється при термолізі гідратів, є метастабільною, не щільновпакованою та має нижче значення густини порівняно з відомими модифікаціями. Для безводних оксалатів нікелю(II) та кобальту(II) визначено структуру □-модифікації, яка є продуктом термолізу відповідних гідратів. Показано, що розупорядкованість структури зберігається при термолізі, і тому □-модифікація може бути розупорядкованою, всупереч існуючим літературним даним. Визначено структуру форміату срібла(I), особливістю якої є утворення кластерів Ag–Ag=2,919 Å, що спостерігаються і в інших сполуках даного металу. Аналізом структури цієї нестабільної сполуки показано, що її спонтанний розпад за кімнатної температури призводить до утворення пластівчастих наночастинок металічного срібла.

2. The thesis is devoted to the study of new structures as well as structural features of hydrates, anhydrous oxalates and transition metal formates already known from the literature using modern X-ray diffraction methods using data from scanning electron microscopy and thermogravimetric analysis. Structural data of three polymorphic □', □" and □-modifications of manganese(II) oxalate dihydrate were obtained, which were formed simultaneously during the spontaneous decomposition of manganese(II) oxalate trihydrate crystals. Study of powder samples of manganese(II), cobalt(II) and nickel(II) oxalate dihydrates showed that their structure is disordered. The model of disordering is proposed for calculations and can be used for similar compounds, whereas the existing model of OD-structures is unacceptable for use in the Rietveld method. A new polymorphic modification of anhydrous manganese(II) and cadmium(II) oxalate (□-MnC2O4 and □-CdC2O4) was obtained from powder X-ray diffraction data which was formed from thermal decomposition of hydrates and found to be metastable, not densely packed, and to have lower values of density than those of the known modifications. Structure of the □-modification of anhydrous nickel(II) and cobalt(II) oxalates was determined, which were obtained by thermal decomposition of corresponding hydrates. It was shown that the disordering of the structure was preserved during thermal decomposition, and therefore the □-modification can be disordered, contrary to the existing literature data. Crystal structure of the silver(I) formate has been determined whose feature is the formation of Ag–Ag = 2.919 Å clusters, which are also observed in other compounds of this metal. An analysis of this unstable compound structure has shown that its spontaneous decomposition at room temperature leads to the formation of layered metallic silver nanoparticles.

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. Баумер Вячеслав Миколайович

2. Baumer Viachesla M.

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 Іван Миколайович
2. V`unnik Ivan M.

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. Ракитська Тетяна Леонідівна
2. Rakitskaya Tetyana L.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.