Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U002772

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-07-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Нагорний Антон Артурович
2. Nagorniy Anton

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

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: Неорганічна і координаційна хімія, фізична хімія, електрохімія

Дата захисту:

Спеціальність за освітою: Хімічні технології та інженерія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10238

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.25.09, 31.15.33.05, 31.15.19, 31.15.33

Тема дисертації:

1. Особливості переносу заряду у фторидпровідних фазах MxPb0,86-xSn1,14F4±x (M = K, Rb, Sr, Ba, Nd, Sm)
2. Charge transfer in MxPb0,86-xSn1,14F4±x (M = K, Rb, Sr, Ba, Nd, Sm) fluoride-conducting phases

Реферат:

1. Дисертаційна робота спрямована на вирішення одного із актуальних завдань сучасної науки та техніки – розроблення наукових засад хімічного дизайну електродних та електролітних матеріалів хімічних джерел струму нового покоління. В результаті наукових досліджень даної роботи вперше виявлено, що часткове заміщення у складному фториді □-PbSnF 4 , одному з найкращих відомих на сьогодні уніполярних аніонних провідників, катіонів плюмбуму катіонами станнуму які мають неподілену стереоактивну пару 5s 2 електронів, сприяє збільшенню електропровідності. Найвищу провідність, яка при 293 K майже на порядок величини перевищує провідність □-PbSnF 4 , має фаза складу Pb 0,86 Sn 1,14 F 4 . Заміщення частини катіонів плюмбуму

катіонами K + , Rb + , Nd 3+ , Sm 3+ у нестехіометричній фазі Pb 0,86 Sn 1,14 F 4 , на відміну від стехіометричної фторидпровідної фази □-PbSnF 4 , сприяє збільшенню електропровідності як при температурах до перегину на політермах провідності, так і після нього. Найкращу провідність у порівнянні з вихідною фазою мають фази такого складу: K 0,03 Pb 0,83 Sn 1,14 F 3,97 (□ 373 = 0,12 См/см, □ 573 = 0,37 См/см), Rb 0,2 Pb 0,66 Sn 1,14 F 3,80 (□ 373 = 7,72·10 -2 См/см, □ 573 = 0,34 См/см), Nd 0,17 Pb 0,69 Sn 1,14 F 4,17 (□ 373 = 3,7·10 -2 См/см, □ 573 = 0,33 См/см) та Sm 0,10 Pb 0,76 Sn 1,14 F 4,10 (□ 373 = 1,1·10 -2 См/см, □ 573 = 0,12 См/см). Ізовалентне заміщення частини катіонів стронцію катіонами плюмбуму у фторидпровідних фазах Pb x Sr 1-x SnF 4 сприяє утворенню фаз з більш високою провідністю у порівнянні з вихідною фазою. Залежність провідності від вмісту замісника має екстремальний характер. Найвищу провідність мають фази, у яких вміст замісника відповідає переходу кристалічної гратки із структурного типу SrSnF 4 у структурний тип □-PbSnF 4 і відповідає складу Pb 0,25±0,02 Sr 0,75±0,02 SnF 4 . Необхідною умовою синтезу стехіометричного складного фториду SrSnF 4 , вільного від домішкових фаз, є спікання індивідуальних фторидів станум та стронцію в еквівалентному співвідношенні при температурах вищих за температуру фазового переходу SrSnF 4 кубічної модифікації у тетрагональну (623 K). Зі збільшенням температури тривалість синтезу зменшується. Провідність зразків SrSnF 4 , які містять домішкові фази, вища за провідність вільної від домішок вихідної сполуки. Фторидпровідні фази ізовалентного заміщення Ba x Pb 0,86-x Sn 1,14 F 4 , утворюються в усьому інтервалі концентрацій ізовалентного замісника (0 < x ≤ 0,86), провідність отриманих зразків проходить через максимум і зразок складу Ba 0,43 Pb 0,43 Sn 1,14 F 4 характеризується параметрами провідності що на порядок перевищують провідність вихідної фази (□ 373 = 0,12 См/см, ΔE□ = 0,12 еВ). Числа переносу за аніонами фтору всіх синтезованих та досліджених фторидпровідних фаз близькі до теоретичних і складають 0,97 ± 0,02 не залежно від складу, внесок електронної складової провідності незначний. Розроблено методики синтезу фторидпровідних фаз зі структурою □PbSnF 4 , пріоритет та новизну яких підтверджено патентом України на корисну модель. Встановлено концентраційні інтервали існування фторидпровідних фаз гетеровалентного заміщення. Отримана інформація необхідна для оптимізації складу електродних та електролітних матеріалів ФІБ, а також може бути використана для створення функціональних матеріалів електрохімічних пристроїв різного призначення. Інформація про провідність синтезованих фаз в залежності від складу та температури має самостійне практичне значення як довідниковий матеріал.

2. This thesis is aimed at solving one of the urgent problems of modern science and technology - the development of scientific principles of chemical design of electrode and electrolyte materials for new generation of chemical current sources. For the first time it was found that partial substitution of lead cations by tin cations (characterized by lone stereoactive pair of 5s 2 electrons) in the □-PbSnF 4 complex fluoride (one of the best known unipolar anionic conductors) increases the electrical conductivity. The highest conductivity, which at 293 K is almost an order of magnitude higher than the conductivity of □-PbSnF 4 , is that of the Pb 0,86 Sn 1,14 F 4 . Substitution of a part of lead cations with K + , Rb + , Nd 3+ , Sm 3+ in the Pb 0,86 Sn 1,14 F 4 non-stoichiometric phase, in contrast to the stoichiometric fluoride-conducting phase □-PbSnF 4 , contributes to an increase in electrical conductivity both at temperatures close to room temperature and at high temperatures. Phases of the following composition have the best conductivity compared to the original phase: K 0,03 Pb 0,83 Sn 1,14 F 3,97 (□ 373 = 0,12 S/cm, □ 573 = 0,37 S/cm), Rb 0,2 Pb 0,66 Sn 1,14 F 3,80 (□ 373 = 7,72·10 -2 S/cm, □ 573 = 0,34 S/cm), Nd 0,17 Pb 0,69 Sn 1,14 F 4,17 (□ 373 = 3,7·10 -2 S/cm, □ 573 = 0,33 S/cm) and Sm 0,10 Pb 0,76 Sn 1,14 F 4,10 (□ 373 = 1,1·10 -2 S/cm, □ 573 = 0,12 S/cm). Isovalent substitution of a part of strontium cations by lead cations in fluoride-conducting phases of Pb x Sr 1-x SnF 4 promotes the formation of phases with higher conductivity compared to the initial phase. The dependence of conductivity on the substituent content has an extreme character. The highest conductivity is observed in the phases in which the substituent content corresponds to the transition of the crystal lattice from the structural type of SrSnF 4 to the structural type of □-PbSnF 4 and corresponds to the Pb 0,25±0,02 Sr 0,75±0,02 SnF 4 composition. Prerequisite for the synthesis of stoichiometric SrSnF 4 complex fluoride free of impurity phases is the sintering of individual tin and strontium fluorides in an equivalent ratio at temperatures above the phase transition temperature of SrSnF 4 cubic modification to tetragonal (623 K). The synthesis duration decreases with increasing temperature. The conductivity of SrSnF 4 samples containing impurity phases is higher

than the conductivity of the impurity-free starting compound. Ba x Pb 0,86-x Sn 1,14 F 4 fluoride-conducting phases of isovalent substitution are formed in the entire concentration range of the isovalent substituent (0 < x ≤ 0,86), the conductivity values of the obtained samples passes through the maximum and the sample of Ba 0,43 Pb 0,43 Sn 1,14 F 4 composition is characterized by conductivity parameters that are an order of magnitude higher than the conductivity of the initial phase (□ 373 = 0,12 S/cm, ΔE□ = 0,12 eV). Transfer numbers for fluorine anions of all synthesized and studied fluoride- conducting phases are close to theoretical ones and amount to 0,97 ± 0,02, regardless of the composition, the contribution of the electronic component of conductivity is insignificant. Methods for the synthesis of fluoride-conducting phases with the structure of □-PbSnF 4 have been developed, the priority and novelty of which is confirmed by the patent of Ukraine. The information obtained is necessary for optimizing the composition of electrode and electrolyte materials of FIB, and can also be used to create functional materials for electrochemical devices for various purposes.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Погоренко, Ю. В., Нагорний, А. А., Омельчук, А. О. Синтез та електропровідність твердих розчинів системи PbF2–NdF3–SnF2. Український хімічний журнал. 2020, 86(8), с. 24-37.
- Погоренко, Ю. В., Нагорний, А. А., Омельчук, А. О. Електропровідність твердих розчинів Pb0,86□xSmxSn1,14F4+x. Український хімічний журнал, 87(1), 13-22. https://doi.org/10.33609/2708-129X.87.01.2021.13-22
- Нагорний, А. А., Волошановська, Ю. В., Омельчук, А. О. Електропровідність твердих фторидних фаз складу BaxPb0,86-xSn1,14F4. Український хімічний журнал. 2022, 88(11), с. 39-54.
- Anton A. Nahornyi, Anatoli O. Omelchuk Synthesis and electrical conductivity of fluoride-conducting phases SrSnF4 and PbxSr1-xSnF4. Journal of Chemistry and Technologies. 2025, 33(1), p. 108-116.
- Нагорний, А. А. Омельчук, А. О. Вплив гетеровалентних замісників на провідність фторидпровідних фаз MxPb1-xSnF4±x та MxPb0,86-xSn1,14F4±x (M=K, Rb, Nd, Sm), Український хімічний журнал. 2025, 91(4), с. 72-87.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0118U003438 0122U000842 0123U100606

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Омельчук Анатолій Опанасович

2. Anatolii O. Omelchuk

Кваліфікація: д.х.н., професор, член-кор., 02.00.05

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сокольський Георгій Володимирович
2. Heorhii Sokolskyi

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.04

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-6665-2744

Додаткова інформація: ;https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=QRQHntgAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хоменко Володимир Григорович
2. Volodymyr G. Khomenko

Кваліфікація: д. т. н., 05.17.03

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:
;https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004402598;https://orcid.org/0000-0003-0013-8010;https://scholar.google.com.ua/citations?user=vBRqePMAAAAJ&hl=ru

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет технологій та дизайну

Код за ЄДРПОУ: 02070890

Місцезнаходження: вул. Мала Шияновська, буд. 2, Київ, 01011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фоманюк Сергій Станіславович
2. Sergii S. Fomanyuk

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.05

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Торчинюк Павло Васильович
2. Pavlo V. Torchyniuk

Кваліфікація: д.філософ, 102

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Колбасов Геннадій Якович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Колбасов Геннадій Якович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Надія Іваха
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна