

Міністерство освіти і науки України
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

**ПРАВИЛА ТА ОСОБЛИВОСТІ ОФОРМЛЕННЯ
ДИСЕРТАЦІЙНОЇ РОБОТИ З ХІМІЇ
ЗДОБУВАЧАМИ НАУКОВОГО СТУПЕНЯ ДОКТОРА
ФІЛОСОФІЇ (КАНДИДАТА НАУК)**

Методичні вказівки до курсу «Методи, аналіз та презентація результатів
наукових досліджень»
рівень вищої освіти третій (PhD)
спеціальність 102 «Хімія»

Одеса–2021

УДК 001.89
М299

Рекомендовано до друку вченою радою факультету
хімії та фармації ОНУ імені І. І. Мечникова,
протокол № 6 від 21 грудня 2020 року

Рецензенти:

І.Й. Сейфулліна, доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри прикладної хімії та хімічної освіти Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

О. В. Шевченко, доктор хімічних наук, доцент кафедри органічної та фармацевтичної хімії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

М299 Правила та особливості оформлення дисертаційної роботи з хімії здобувачами наукового ступеня доктора філософії (кандидата наук): методичні вказівки / укладач О. Е. Марцинко. – Одеса, 2021. – 36 с.

Методичні вказівки з курсу «Методи, аналіз та презентація результатів наукових досліджень» дозволять студентам третього (PhD) рівня вищої освіти правильно оформити та підготувати власну дисертацію зі спеціальності 102 Хімія та є адаптованим змістом відповідного наказу Міністерства освіти і науки України № 40 від 12.01.2017 (<https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0155-17#Text>), що додатково проілюстрований прикладами з дисертаційних робіт з хімії.

УДК 001.89

ЗМІСТ

Вступ.....	4
1. Загальні положення щодо оформлення дисертаційної роботи	6
2. Структура дисертації.....	6
3. Вимоги до структурних елементів	6
Література та посилання.....	33

Вступ

Метою викладання навчальної дисципліни «Методи, аналіз та презентація результатів наукових досліджень» є підготовка PhD студентів до здійснення науково-дослідницької діяльності, ознайомлення зі стратегією та тактикою аналізу інформаційних джерел, організації наукової праці, проведення експериментальних досліджень з хімії, надання їм певних знань щодо методики й інструментарію дослідження, написання наукових статей, а також правил підготовки, оформлення та захисту дисертаційної роботи..

Основними завданнями вивчення дисципліни є:

- розширити в PhD студентів спектр знань у сфері сучасних методів проведення наукових досліджень з хімії;
- надати PhD студентам необхідні знання та практичні навички для пошуку, накопичення та аналізу наукової інформації з теми дисертаційного дослідження, написання наукових публікацій, оформлення та захисту дисертації;
- сприяти розвитку професійних умінь з формулювання та презентації результатів проведених досліджень.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії (кандидата наук) оформлюється згідно до вимог, затверджених наказом Міністерства освіти і науки України № 40 від 12.01.2017 (zareestrovano v Ministerstvi yustitsii Ukraini 03.02. 2017 za № 155/30023).

<https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0155-17#Text>

<https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0155-17#n13>

Дані методичні вказівки є адаптованим змістом наказу, додатково проілюстрованим прикладами з дисертаційних робіт з хімії, що взято зі сторінок спеціалізованих вчених рад із захисту дисертацій хімічних факультетів провідних ЗВО України (<https://chem.lnu.edu.ua/research/scientific-council>, <https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/6193>). Дані вказівки дозволять студентам третього (PhD) рівня вищої освіти правильно оформити та підготувати власну дисертацію зі спеціальності 102 Хімія.

1. Загальні положення щодо оформлення дисертаційної роботи

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії (кандидата наук) готується державною мовою у вигляді спеціально підготовленої наукової праці на правах рукопису в твердій або м'якій палітурці та в електронній формі. За бажанням здобувача дисертація може бути перекладена англійською або іншою мовою, пов'язаною з предметом дослідження, з поданням перекладу до спеціалізованої вченої ради.

2. Структура дисертації

Дисертація повинна мати такі основні структурні елементи:

титульний аркуш;

анотація;

зміст;

перелік умовних позначень (за необхідності);

основна частина;

список використаних джерел;

додатки.

Кожен з цих елементів, а також розділи основної частини та додатки мають починатися з нової сторінки.

3. Вимоги до структурних елементів

1. Титульний аркуш дисертації оформляється за формою (приклад 1):

Найменування вищого навчального закладу або наукової установи,
де здійснювалася підготовка здобувача,
органу, до сфери управління якого належить заклад, установа

Найменування вищого навчального закладу або наукової установи,
у спеціалізованій вченій раді якого (якої) проводився захист дисертації,
органу, до сфери управління якого належить заклад, установа

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

(прізвище, ім'я, по батькові)

Гриф
Прим. № ____
УДК ____
(індекс)

ДИСЕРТАЦІЯ

(назва дисертації)

(шифр і назва спеціальності)

(галузь знань)

Подається на здобуття наукового ступеня _____

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

(підпис, ініціали та прізвище здобувача)

Науковий керівник (консультант) _____
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

Місто - рік

Примітка. Відомості щодо грифа секретності та напис «Прим. № ____» наводять за необхідності.

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

СЕНЧУК ОЛЕКСАНДР ЮРІЙОВИЧ

УДК 546:548.736.4:548.734.384:544.015.35

Дисертація

Фазові рівноваги та кристалічна структура сполук
у системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb}

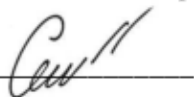
02.00.01 - неорганічна хімія

Природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

Сенчук О.Ю.



Науковий керівник – доктор хімічних наук, член-кореспондент НАН України,
професор Гладишевський Р. Є.

Львів - 2018

Приклад 1. Оформлення титульного листа дисертаційної роботи

(дисертація Сенчука О.Ю., 2018)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

2. Для ознайомлення зі змістом та результатами дисертації подається державною та англійською мовами анотація - узагальнений короткий виклад її основного змісту відповідно до встановленого зразка. В анотації дисертації мають бути стисло представлені основні результати дослідження із зазначенням наукової новизни та наявності практичного значення.

В анотації також вказуються:

прізвище та ініціали здобувача;

назва дисертації;

вид дисертації та науковий ступінь, на який претендує здобувач;

спеціальність (шифр і назва);

найменування вищого навчального закладу або найменування наукової установи, у якому (якій) здійснювалася підготовка;

найменування наукової установи або найменування вищого навчального закладу, у спеціалізованій вченій раді якої (якого) відбудеться захист;

місто, рік.

Обсяг анотації становить 0,2 - 0,3 авторських аркуша.

Анотація може подаватися також третьою мовою, пов'язаною з предметом дослідження (приклади 2, 3).

АНОТАЦІЯ

Сенчук О.Ю. Фазові рівноваги та кристалічна структура сполук у системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb}. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 “Неорганічна хімія”. – Міністерство освіти і науки України, Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2018. – Львівський національний університет імені Івана Франка.

Зміст анотації:

Встановлення фазових рівноваг у багатокомпонентних металічних системах та визначення кристалічної структури інтерметалічних сполук є одією з важливих сфер досліджень сучасної неорганічної хімії. Велика кількість можливих комбінацій хімічних елементів і різноманіття кристалічних структур та властивостей інтерметалічних сполук роблять перспективним дослідження систем, що складаються з трьох та більше компонентів. Встановлення фазових рівноваг та кристалічної структури сполук у трикомпонентних системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} дозволить розширити обсяг знань про взаємодію компонентів у трикомпонентних системах $R-T-M$ (R – рідкісноземельний метал, T – перехідний d -метал, M – p -елемент) та сприятиме виведенню певних закономірностей утворення тернарних сполук у цих системах.

Під час проведення досліджень методом електродугового сплавлення шихти вихідних компонентів синтезовано трикомпонентні сплави у системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} та двокомпонентні сплави в окремих подвійних системах, які обмежують вказані потрійні системи, а також низку сплавів у споріднених системах $R-Ti-Sn$ та $R-Ti-Pb$. Фазовий склад сплавів та кристалічні структури фаз визначено за допомогою рентгенівського фазового та рентгенівського структурного аналізів методом порошку. Для окремих зразків проведено дослідження методом скануючої електронної мікроскопії та

Приклад 2. Оформлення анотації

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

SUMMARY

Senchuk O.Yu. Phase equilibria and the crystal structure of the compounds in the {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} systems. – Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for a PhD degree in chemical sciences, specialty 02.00.01 "Inorganic chemistry" – Ministry of Education and Science of Ukraine, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, 2018. – Ivan Franko National University of Lviv.

Content of the summary:

Приклад 3. Фрагмент анотації англійською мовою

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

3. Наприкінці анотації наводяться ключові слова відповідною мовою. Сукупність ключових слів повинна відповідати основному змісту наукової праці, відображати тематику дослідження і забезпечувати тематичний пошук роботи. Кількість ключових слів становить від п'яти до п'ятнадцяти. Ключові слова подають у називному відмінку, друкують в рядок через кому (приклад 4).

Ключові слова: рідкісноземельний метал, станід, стибід, плюмбід, рентгенівський фазовий та структурний аналізи, діаграма стану, ряд ізоструктурних сполук, кристалічна структура, електронна структура, хімічний зв'язок.

Приклад 4. Ключові слова

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

4. Після ключових слів наводиться список публікацій здобувача за темою дисертації (приклад 5). Вказуються наукові праці:

в яких опубліковані основні наукові результати дисертації;

які засвідчують апробацію матеріалів дисертації;

які додатково відображають наукові результати дисертації.

Список публікацій:

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Senchuk O. Phase equilibria in the ternary system Ce-Ti-Sn at 600°C / O. Senchuk, Ya. Tokaychuk, P. Demchenko, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. – 2015. – Vol. 8. – P. 106-111.
2. Сенчук О. Нові сполуки RTi_6Sn_4 ($R = La-Nd, Sm$) / О. Сенчук, П. Демченко, Я. Токайчук, Р. Гладишевський // Вісник Львів. ун-ту. Сер. хім. – 2016. – Вип. 57, Ч. 1. – С. 105-111.
3. Senchuk O.Yu. Novel ternary stannides and plumbides of rare-earth metals and titanium with $ZrFe_6Ge_4$ -type structures / O.Yu. Senchuk, Ya.O. Tokaychuk, P.Yu. Demchenko, R.E. Gladyshevskii // Solid State Phenom. – 2017. – Vol. 257. – P. 56-59.

Наукові праці, які засвідчують апробацію результатів дисертації:

1. Сенчук О. Система Ce-Ti-Sn при 600°C / О. Сенчук, П. Демченко, Я. Токайчук, Р. Гладишевський // Зб. наук. праць XV Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2015”. – Львів, 2015. – С. 277. (стендова доповідь)
2. Senchuk O. Crystal structures of the novel RTi_6Sn_4 compounds ($R = La-Nd, Sm$) / O. Senchuk, Ya. Tokaychuk, P. Demchenko, R. Gladyshevskii // Coll. Abs. XX Int. Sem. Phys. Chem. Solids. – Lviv, 2015. – P. 37. (усна доповідь)
3. Senchuk O.Yu. Novel ternary stannides and plumbides of rare-earth metals and titanium with $ZrFe_6Ge_4$ -Type Structures / O.Yu. Senchuk, Ya.O. Tokaychuk, P.Yu. Demchenko, R.E. Gladyshevskii // Coll. Abs. XX Int. Conf. Solid Compd. Transition Elem. – Zaragoza, Spain, 2016. – P. 339. (стендова доповідь)

Приклад 5. Оформлення списку публікацій в анотації

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

5. Зміст повинен містити назви всіх структурних елементів, заголовки та підзаголовки (за їх наявності) із зазначенням нумерації та номери їх початкових сторінок (приклад 6).

2

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ ТА УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	5
ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	12
1.1. Різновалентні форми існування іонів ванадію та селену.....	12
1.2. Особливості пробопідготовки та визначення іонів ванадію та селену з використанням органічних реагентів.....	22
1.3. Кармоазін – редокс-реагент для спектрофотометричного визначення ряду іонів металів в їх вищих ступенях окиснення	28
1.4. Особливості використання азобарвника кармоазіна (Е 122)	34
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1.....	40
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	41
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕСПЕРИМЕНТУ	60
2.1. Реактиви, апаратура і допоміжне обладнання.....	60
2.2. Методика вольтамперометричного дослідження поведінки кармоазіна на вугільно-пастовому електроді в водних розчинах.....	64
2.3. Способи активування реакцій взаємодії ванадію (V) і селену (VI) з кармоазіном.....	65
2.4. Методики оптимізації умов взаємодії ванадію (V) і селену (VI) з кармоазіном у розчинах.....	66
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2.....	69
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	70
РОЗДІЛ 3. ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ КАРМОАЗІНУ З ІОНАМИ ВАНАДІЮ (V) І СЕЛЕНУ (VI) У РОЗЧИНАХ	72
3.1. Окисно-відновні перетворення кармоазіну на вугільно-пастовому електроді в водних розчинах.....	72
3.2. Взаємодія ванадію (V) з кармоазіном в водно-етанольному розчині	77
3.3. Взаємодія селену (VI) з кармоазіном в водно-етанольному розчині	85

3.4. Дослідження можливості визначення V(V) та Se(VI) з використанням кармоазіну в стічних водах різних виробництв.....	93
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3.....	99
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	100
РОЗДІЛ 4. ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ V(V) ТА Se(VI) В ПРИСУТНОСТІ МЕТАЛІВ В ЇХ ВИЩИХ СТУПЕНЯХ ОКИСНЕННЯ	104
4.1. Порівняльні дослідження редокс-метричної поведінки V(V), Se(VI), Mn(VII), Cr(VI), Ce(IV), Hg(II) з кармоазіном.....	104
4.2. Редокс-метричне титрування двокомпонентних систем типу «M ₁ –M ₂ » розчином кармоазіну при оптимальних умовах взаємодії M, де M – V(V), Se(VI), Cr(VI), Mn(VII).....	107
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 4.....	118
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	119
РОЗДІЛ 5. ПРАКТИЧНЕ ЗАСТОСУВАННЯ НОВИХ АНАЛІТИЧНИХ ФОРМ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВАНАДІЮ, СЕЛЕНУ НА ОСНОВІ ПРОДУКТІВ ЇХ ВЗАЄМОДІЇ З КАРМОАЗІНОМ В ОБ'ЄКТАХ РІЗНОЇ ПРИРОДИ	121
5.1. Визначення ванадію в об'єктах різної природи.....	121
5.1.1. Методика пробопідготовки об'єктів в аналітичний зразок	123
5.1.2. Методика спектрофотометричного визначення ванадію (V) в харчових продуктах і полівітаміному комплексі.....	126
5.2. Визначення селену в об'єктах різної природи.....	128
5.2.1. Методика пробопідготовки об'єктів в аналітичний зразок	130
5.2.2. Методика спектрофотометричного визначення селену (VI) в харчових продуктах, лікарських травах і полівітаміному комплексі.....	135
5.3. Методика визначення ванадію і селену при сумісній присутності в рослинних об'єктах.....	137
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 5.....	140
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	141
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ	144
ДОДАТКИ	

Приклад 6. Оформлення змісту (дисертація Рабошвіль К.В., 2020)

<https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

6. Перелік умовних позначень, символів, одиниць вимірювання, скорочень подається за необхідності у вигляді окремого списку. Додатково їхнє пояснення наводиться у тексті при першому згадуванні. Скорочення, символи, позначення, які повторюються не більше двох разів, до переліку не вносяться (приклад 7).

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ ТА УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ААС	- атомно-абсорбційна спектроскопія
ПВЕ	- полівалентні елементи
ДМСО	- диметилсульфоксид
ДМФА	- диметилформамід
ДМК	- диметилкетон (ацетон)
КАН	- 4-сульфо-2(4'-сульфонафталін-1'-азо)нафтол-1 (кармоазін)
КАОН	- кармоазон
М	- іоно металу
КС	- комплексна сполука
ОР	- органічний реагент
ОВР	- окисно-відновна реакція
ОВП	- окисно-відновний потенціал
ГДК	- гранично-допустима концентрація
ПАР	- поверхнево-активні речовини
ПОР	- полярний органічний розчинник
УЗ	- ультразвук
МХ	- мікрохвильове (випромінювання)
ВПЕ	- вугільно-пастовий електрод
ФАГ	- функціонально-аналітична група
ЦПСІ	- цитилпіридиній хлорид
ЕТСІ	- 1,2-етилєн-біс-(N-децилоксикарбонілметил-N,N-диметил амоній)діхлорид (етоній хлорид)

Приклад 7. Оформлення переліку умовних позначень (дисертація

Рабошвіль К.В., 2020) <https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

7. Основна частина дисертації має містити:

вступ;

розділи дисертації;

висновки.

Обсяг основного тексту дисертації вираховується авторськими аркушами.

8. У вступі подається загальна характеристика дисертації, а саме:

обґрунтування вибору теми дослідження - висвітлюється зв'язок теми дисертації із сучасними дослідженнями у відповідній галузі знань шляхом критичного аналізу з визначенням сутності наукової проблеми або завдання (приклад 8);

мета і завдання дослідження відповідно до предмета та об'єкта дослідження (приклад 9);

методи дослідження - перераховуються використані наукові методи дослідження та змістовно відзначається, що саме досліджувалось кожним методом; обґрунтовується вибір методів, що забезпечують достовірність отриманих результатів та висновків (приклад 9);

наукова новизна отриманих результатів - аргументовано, коротко та чітко представляються основні наукові положення, які виносяться на захист, із зазначенням відмінності одержаних результатів від відомих раніше (приклад 10);

Актуальність теми. Важливою складовою розробки функціональних неорганічних матеріалів є синтез і дослідження кристалічної структури нових хімічних сполук, що володіють необхідними властивостями. Встановлення кристалічної структури є важливим як для практичного впровадження сполук, так і для теоретичного узагальнення та систематизації знань про речовини. Це також дозволяє вивести кристалохімічні закономірності сполук і, цим самим, зробити процес пошуку нових речовин цілеспрямованим.

Провідне місце серед функціональних матеріалів належить інтерметалічним сполукам. До найбільш розповсюджених матеріалів, що володіють високою провідністю, входять алюміній, мідь та їхні сплави. Алюмініди цікаві тим, що матеріали на їхній основі характеризуються міцністю, легкістю та високою корозійною стійкістю. Різноманітні властивості алюмінієвих сплавів покращуються додаванням різних компонентів, зокрема, міді, тому для дослідження вибрано системи Sc-Cu-Al, Ti-Cu-Al та V-Cu-Al. Умови утворення тернарних алюмінідів, дослідження їхньої структури та властивостей, зокрема механічних та електричних, дасть можливість прогнозувати подальше застосування цих інтерметалідів.

Приклад 8. Актуальність теми (дисертація Климентій Н.О., 2019)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/01/Klymentiy_dysertatsiia.pdf

особистий внесок здобувача - якщо у дисертації використано ідеї або розробки, що належать співавторам, разом з якими здобувачем опубліковано наукові праці, обов'язково зазначається конкретний особистий внесок здобувача в такі праці або розробки; здобувач має також додати посилання на дисертації співавторів, у яких було використано результати спільних робіт (приклад 11);

Мета і завдання дослідження. Метою дослідження є встановлення фазових рівноваг у трикомпонентних металічних системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} і визначення кристалічної структури бінарних та тернарних фаз, що утворюються в цих системах. Для досягнення поставленої мети було необхідно:

- дослідити фазовий склад синтезованих сплавів, встановити фазові рівноваги у системах, визначити розчинність третього компонента у бінарних сполуках та області гомогенності тернарних фаз, побудувати ізотермічні перерізи діаграм стану систем при 600°C;
- порівняти особливості взаємодії компонентів у досліджених системах;
- визначити кристалічну та електронну структуру сполук та здійснити пошук ізоструктурних сполук у споріднених системах;
- проаналізувати закономірності утворення тернарних сполук та їхніх кристалічних структур, вплив різних чинників (розмірний, електронний тощо) на склад тернарних фаз, їхню кількість у системах.

Об'єкт дослідження – взаємодія компонентів у металічних системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} та деяких споріднених системах.

Предмет дослідження – фазові рівноваги у системах Ce-Ti-Sn, Gd-Ti-Sn, Ce-Zr-Sn, Gd-Zr-Sn, Ce-Ti-Sb, Gd-Ti-Sb, Ce-Zr-Sb, Gd-Zr-Sb, кристалічна структура та закономірності утворення тернарних сполук, особливості взаємодії компонентів у досліджених системах.

Методи дослідження – електродугова плавка та гомогенізуючий відпал для синтезу зразків, рентгенівський фазовий та структурний аналізи методом порошку для встановлення фазових рівноваг та кристалічної структури сполук, скануюча електронна мікроскопія та локальний рентгеноспектральний аналіз для встановлення елементного складу фаз, диференціальна скануюча калориметрія для встановлення температури фазових переходів, комп'ютерні методи для розрахунку електронної структури сполук та обробки результатів експерименту.

Приклад 9. Мета, завдання, предмет, об'єкта та методи дослідження

(дисертація Сенчука О.Ю., 2018)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

Наукова новизна отриманих результатів. Вивчено особливості окисно-відновної поведінки КАН на вугільно-пастовому електроді в водних розчинах та запропоновано відповідну схему зазначених процесів. Методом циклічної вольтамперометрії встановлено, що для КАН спостерігаються піки окиснення (935 мВ) і відновлення (-170 мВ), а відповідні струми мають адсорбційну природу.

Вперше досліджено та оптимізовано умови використання КАН як селективного редокс-реагенту для спектрофотометричного визначення іонів V(V) і Se(VI) (кислотність і природа середовища, температура, співвідношення реагуючих компонентів). Показано, що присутність найбільш розповсюджених іонів, які складають макро- і мікросклад досліджуваних об'єктів аналізу не заважають визначенню ванадію та селену з КАН.

Встановлено активуючу дію іонів Mn(VII) на здатність до взаємодії іонів V(V) і Se(VI) з КАН за кімнатної температури, причому така дія Mn(VII) проявляється при його надлишку (5:1; 10:1) стосовно вказаних форм.

Приклад 10. Наукова новизна результатів роботи

(дисертація Рабошвіль К.В., 2020)

<https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

Особистий внесок здобувача. Пошук і аналіз літературних даних за темою дисертації, проведення основного обсягу експериментальних досліджень, отримання наукових результатів та їх математичної обробки виконані автором самостійно. Постановка мети і завдань дослідження, а також аналіз, узагальнення отриманих результатів проведені спільно з науковим керівником к.х.н., доц. Чеботарьовим О.М. Автор вдячна к.х.н. Єфімовій І.С. за допомогу в апробації і впровадженні нових аналітичних форм ванадію (V) і селену (VI) з КАН в практику хімічного аналізу реальних об'єктів, а також к.х.н. Снігуру Д.В. та аспіранту Плюті К.В. за участь у вольтамперометричних дослідженнях.

Приклад 11. Оформлення особистого внеску здобувача (дисертація Рабошвіль К.В., 2020) <https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

апробація матеріалів дисертації - зазначаються назви конференції, конгресу, симпозіуму, семінару, школи, місце та дата проведення(приклад 12);

публікації автора за темою дисертаційної роботи (приклад 12);

структура та обсяг дисертації - анонсується структура дисертації, зазначається її загальний обсяг(приклад 12).

Апробація результатів роботи. Основні результати дисертаційної роботи висвітлено в усних та стендових доповідях на XV та XVI Наукових конференціях “Львівські хімічні читання” (м. Львів, 2015, 2017 рр.); XX Міжнародному семінарі з фізики та хімії твердого тіла (м. Львів, 2015 р.); XX та XXI Міжнародних конференціях з сполук перехідних елементів (м. Сарагоса, Іспанія, 2016 р.; м. Відень, Австрія, 2018 р.); XIII Міжнародній конференції з кристалохімії інтерметалічних сполук (м. Львів, 2016 р.) та на звітних конференціях ЛНУ ім. Івана Франка (2015-2017 рр.).

Публікації. Основний зміст роботи висвітлений у 5 статтях, опублікованих у фахових виданнях, з них 1 – у міжнародному виданні, що входить до наукометричної бази даних Scopus, та тезах 8 доповідей на наукових конференціях.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, 4 розділів, висновків, списку використаних джерел (118 найменувань на 12 сторінках) та 3 додатків. Матеріали роботи викладені на 164 сторінках (без врахування в загальний об’єм таблиць і рисунків, що повністю займають площу сторінки – на 128 сторінках), містять 49 рисунків і 56 таблиць. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 188 сторінок.

Приклад 12. Апробація результатів роботи, публікації автора, структура та обсяг дисертації (дисертація Сенчука О.Ю., 2018)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

За наявності у вступі можуть також вказуватися:

зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами - вказується, в рамках яких програм, тематичних планів, наукових тематик і грантів, зокрема галузевих, державних та/або міжнародних, виконувалося дисертаційне дослідження, із зазначенням номерів державної реєстрації науково-дослідних робіт і найменуванням організації, де виконувалася робота (приклад 13);

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.
Дисертаційна робота є складовою частиною досліджень кафедри неорганічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка, зокрема таких держбюджетних тем: “Синтез і кристалохімія нових інтерметалічних сполук з функціональними властивостями” (2015-2017 рр., номер державної реєстрації 0115U003257), “Нові інтерметаліди як основа енергоефективних матеріалів” (2017-2020 рр., номер державної реєстрації 0117U007192), “Синтез і кристалохімія нових інтерметалідів подвійного призначення” (2018-2020 рр., номер державної реєстрації 0118U003609).

Приклад 13. Оформлення зв'язку роботи з науковими програмами, планами, темами (дисертація Климентій Н.О., 2019)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/01/Klymentiy_dysertatsiia.pdf

практичне значення отриманих результатів - надаються відомості про використання результатів досліджень або рекомендації щодо їх практичного використання (приклад 14).

Практичне значення отриманих результатів. Запропоновано азобарвник КАН в якості редокс-реагенту для спектрофотометричного визначення V(V) і Se(VI) в природних і промислових об'єктах. Встановлено, що визначенню V(V) і Se(VI) не заважають елементи, що містяться в харчових продуктах, лікарських травах, полівітамінних комплексах, водах різних категорій, а саме – K, Ca, Si, Mg, Na, S, P, Cl, Al, B, Fe, Cu, Mo, Ni, Ti, W, Zn, F, I, Mn, Cr, Co.

Виявлені аналітичні форми в редокс-системах «М–КАН» покладено в основу нових спектрофотометричних методик визначення ванадію та селену в харчових продуктах рослинного походження (квасоля, овес, пшениця, горох, гречка; горіх бразильський, гриб білий (суха маса), м'якоть кокосу (стружка), лікарських травах (пижмо – квітки), кореневища валеріани) і фармацевтичному препараті (полівітамінний комплекс VITRUM Century). Запропоновано методики, які володіють високою селективністю до V(V) і Se(VI) з КАН та надають можливість їх визначення з одного аналітичного зразка без відокремлення інших елементів. Правильність розроблених методик підтверджена методом «введено–знайдено» та незалежним методом – атомно-абсорбційної спектрофотометрії.

Запропоновані методики захищені патентами України на корисну модель і відрізняються від раніше відомих простотою виконання, експресністю, високою селективністю і економічною привабливістю.

Розроблені методики спектрофотометричного визначення ванадію з КАН в питних водах впроваджено в роботу Центральної хіміко-бактеріологічної лабораторії ТОВ «ІНФОКС», філія «Інфоксводоканал», м. Одеса (підтверджено актом впровадження). Окремі матеріали дисертаційної роботи введено в навчальний процес кафедри аналітичної хімії хімічного факультету ОНУ імені І.І. Мечникова при вивченні спецкурсів: «Органічні реагенти в аналізі» та «Комплексні сполуки в аналітичній хімії».

Приклад 13. Практичне значення результатів роботи
(дисертація Рабошвіль К.В., 2020)

<https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

9. У розділах дисертації має бути вичерпно і повно викладено зміст власних досліджень здобувача наукового ступеня, зроблено посилання на всі наукові праці здобувача, наведені в анотації. *Список цих праць має також міститися у списку використаних джерел.*

У разі використання наукових результатів, ідей, публікацій та інших матеріалів інших авторів у тексті дисертації обов'язково повинні бути посилання на публікації цих авторів. Фрагменти оприлюднених (опублікованих) текстів інших авторів (цитати) можуть включатися до дисертації виключно із посиланням на джерело (крім фрагментів, які не несуть самостійного змістовного навантаження).

Розділи дисертації можуть поділятися на підрозділи (нумерація складається з номера розділу і порядкового номера підрозділу, відокремлених крапкою), пункти (нумерація - з номера розділу, порядкового номера підрозділу і порядкового номера пункту, відокремлених крапкою), підпункти (нумерація - з номера розділу, порядкового номера підрозділу, порядкового номера пункту і порядкового номера підпункту, відокремлених крапкою). Розділи, підрозділи, пункти і підпункти нумеруються арабськими цифрами.

При нумерації формул і рисунків за наявності посилань на них у тексті дисертації проставляються через крапку номер розділу та номер формули (рисунка). Формула, що нумерується, наводиться посередині нового рядка (нумерація - з правого боку в дужках). Номер та назва рисунка наводяться знизу/з правого боку рисунка (приклад 15).

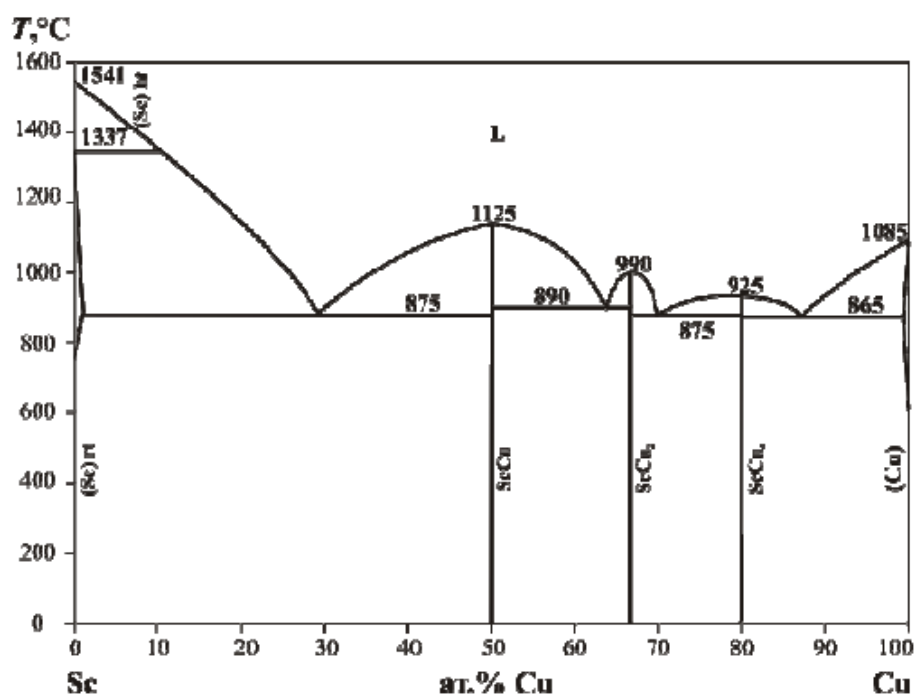


Рис. 1.1. Діаграма стану системи Sc-Cu [4].

Таблиця 1.1

Кристалографічні характеристики сполук системи Sc-Cu

Сполука	СТ	СП	ПГ	Параметри комірки, Å			Літ.
				<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
ScCu ₄	...	<i>tI</i> ...	...	6,536	—	4,031	[8]
ScCu ₂	MoSi ₂	<i>tI</i> 6	<i>I4/mmm</i>	3,290	—	8,388	[7]
ScCu	CsCl	<i>cP</i> 2	<i>Pm-3m</i>	3,256	—	—	[9]

Приклад 15. Оформлення рисунків та таблиць

(дисертація Климетій Н.О., 2019)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2020/01/Klymentiy_dysertatsiia.pdf

10. У висновках викладаються найбільш важливі наукові та практичні результати дисертації, вказуються наукові проблеми, для розв'язання яких можуть бути застосовані результати дослідження, а також можливі напрями продовження досліджень за тематикою дисертації (приклад 16).

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі узагальнено результати дослідження особливостей редокс-поведінки азобарвника кармоазину та його взаємодії з іонами металів у вищих ступенях окиснення, на основі яких запропоновано нові аналітичні форми для селективного спектрофотометричного визначення V(V) і Se(VI) в харчових продуктах рослинного походження, лікарських травах і полівітамінному комплексі.

1. Методом циклічної вольтамперометрії встановлено, що для кармоазину спостерігаються піки окиснення (935 мВ) і відновлення (-170 мВ), а струми мають адсорбційну природу. Показано, що процес окиснення і відновлення кармоазину при швидкості більше 100 мВ/с лімітується кінетикою передачі електрону з поверхні електроду. Запропоновано ймовірну схему редокс-перетворення кармоазину у розчині.

2. Встановлено умови утворення та визначено хіміко-аналітичні характеристики нових аналітичних форм на основі продуктів взаємодії ванадію (V) і селену (VI) з кармоазіном у водно-етанольних розчинах відповідно: V:R = 1:3; 0.5 М H₂SO₄; $\lambda_{\text{макс}} = 365 \text{ нм}$; $\varepsilon_{365} = 1.6 \cdot 10^4$; $C_{\text{мін}} = 0.26 \text{ мкг/мл}$ та Se:R = 1:4; 2.5 М H₂SO₄; $\lambda_{\text{макс}} = 370 \text{ нм}$; $\varepsilon_{370} = 1.0 \cdot 10^4$; $C_{\text{мін}} = 1.58 \text{ мкг/мл}$).

3. Методом редокс-метричного титрування досліджено особливості взаємодії іонів полівалентних елементів з кармоазіном. Виявлено активуючу дію іонів Mn(VII) на взаємодію іонів V(V) і Se(VI) з кармоазіном при оптимальних умовах кислотності середовища, характерних для кожного іона окремо, що дозволяє проводити їх визначення за кімнатної температури, та показано, що важливими факторами, які впливають на взаємодію в системах «M₁-M₂-КАН», є величини окисно-відновного потенціалу хімічної системи та кислотність середовища.

4. На основі продуктів взаємодії ванадію (V) та селену (VI) з кармоазіном запропоновано нові аналітичні форми, розроблено прості і експресні

спектрофотометричні методики їх визначення. Показано, що використання органічного редокс-реагенту кармоазину дозволяє визначати ванадій (V) (0.26-1.79 мкг/мл) та селен (VI) (1.58-12.64 мкг/мл) в присутності полівалентних іонів металів та супутніх іонів металів, що формують макро- і мікросклад об'єктів аналізу.

5. Проведено успішну апробацію розроблених методик спектрофотометричного визначення ванадію (V) та селену (VI) з кармоaziном в деяких продуктах харчування рослинного походження, лікарських травах і полівітамінному комплексі.

Приклад 16. Висновки до роботи (дисертація Рабошвіль К.В., 2020)

<https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

11. Список використаних джерел формується здобувачем наукового ступеня за його вибором (опціонально - в кінці кожного розділу основної частини дисертації) одним із таких способів:

у порядку появи посилань у тексті;

в алфавітному порядку прізвищ перших авторів або заголовків;

у хронологічному порядку.

Бібліографічний опис списку використаних джерел у дисертації може оформлятися здобувачем наукового ступеня за його вибором з урахуванням Національного стандарту України ДСТУ 8302:2015 «Інформація та документація. Бібліографічне посилання. Загальні положення та правила складання» або одним зі стилів, віднесених до рекомендованого переліку стилів оформлення списку наукових публікацій.

РЕКОМЕНДОВАНИЙ ПЕРЕЛІК

стилів оформлення списку наукових публікацій

1. MLA (Modern Language Association) style.
2. APA^{-1,2} (American Psychological Association) style.
3. Chicago/Turabian style⁻¹.
4. Harvard style⁻¹.
5. ACS (American Chemical Society) style.
6. AIP (American Institute of Physics) style.
7. IEEE (Institute of Electrical and Electronics Engineers) style.
8. Vancouver style⁻¹.
9. OSCOLA.
10. APS (American Physics Society) style⁻¹.
11. Springer MathPhys Style⁻¹.

⁻¹Springer Style

<http://resource-cms.springer.com/springer-cms/rest/v1/content/51958/data/v1/Guidelines+for+Contributions+to+Major+Reference+Works>

⁻² Elsevier Style

<https://www.elsevier.com/journals/learning-and-instruction/0959-4752/guide-for-authors#68000>

Бібліографічний опис використаного джерела може обмежуватися обов'язковою інформацією, необхідною для однозначної ідентифікації цього джерела.

12. До додатків (приклади 17, 18) може включатися допоміжний матеріал, необхідний для повноти сприйняття дисертації:

проміжні формули і розрахунки;

таблиці допоміжних цифрових даних;

протоколи та акти випробувань, впровадження, розрахунки економічного ефекту, листи підтримки результатів дисертаційної роботи;

інструкції та методики, опис алгоритмів, які не є основними результатами дисертації, описи і тексти комп'ютерних програм вирішення задач за допомогою електронно-обчислювальних засобів, які розроблені у процесі виконання дисертації;

ілюстрації допоміжного характеру;

інші дані та матеріали.

13. Обов'язковим додатком до дисертації є список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації (зазначаються назви конференції, конгресу, симпозіуму, семінару, школи, місце та дата проведення, форма участі).

Вказуються наукові праці автора у послідовності, наведеній п. 4 (стор. 12).

Додатки можуть бути надані у вигляді окремої частини (том, книга).

За наявності практичного значення отриманих результатів надаються відомості про використання результатів досліджень або рекомендації щодо їх використання. У разі якщо результати досліджень впроваджено, відомості подаються із зазначенням найменувань організацій, в яких здійснено впровадження. У цьому випадку додатки можуть містити копії відповідних документів.

ДОДАТКИ

Додаток А. Рентгенівські порошкові дифрактограми окремих зразків

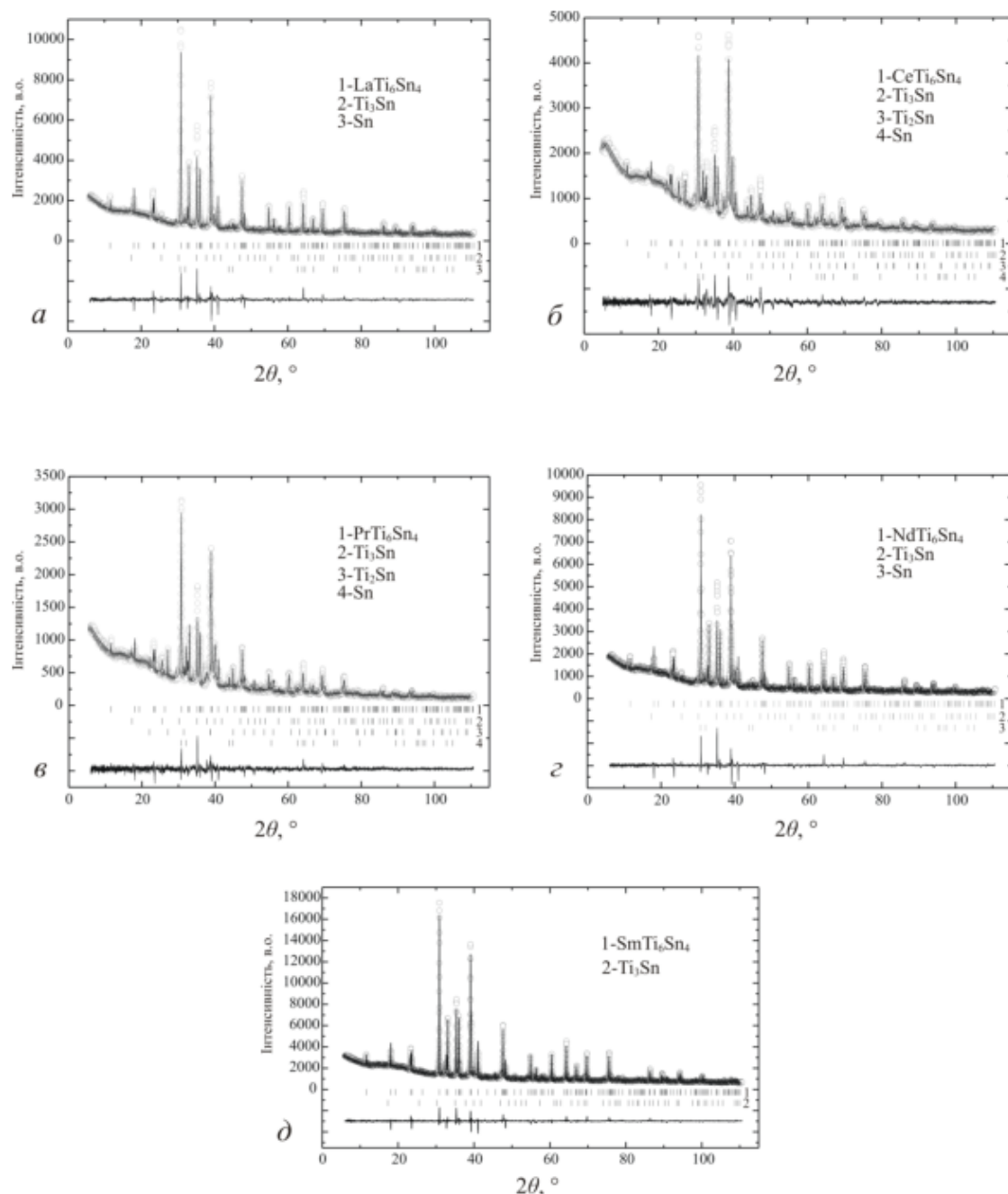


Рис. А1. Експериментальні (кільця), розраховані (суцільні лінії) та різниці (внизу) дифрактограми зразків складу $R_{9,10}\text{Ti}_{54,54}\text{Sn}_{36,36}$ ($R = \text{La-Nd, Sm}$). Вертикальні риски вказують положення відбить окремих фаз.

Приклад 17. Оформленні додатків (дисертація Сенчука О.Ю., 2018)

https://chem.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2018/08/Дисертація_Сенчук.pdf

ДОДАТОК Б

Директор ТОВ «ІНФОКС»
філія «Інфоксводоканал»
м. Одеса
А.В. Леонов



Директор з наукової роботи
ОНУ ім. І.І. Мечникова

к.б.н., проф. В.О. Іваниця



АКТ

«28» вересня 2013 г.

впровадження у виробничу практику ТОВ «ІНФОКС» філія «Інфоксводоканал» м. Одеса розробок кафедри аналітичної хімії хімічного факультету Одеського національного університету (ОНУ) ім. І.І.Мечникова, виконаних за д/б темою № 471 (№ держ. реєстрації – 0111U001377) «Розробка простих, селективних методик визначення біометалів і металів токсикантів змінної валентності при їх сумісній присутності в складних об'єктах».

Цей акт підтверджує, що результати наукових досліджень д/б теми № 471, одержані на кафедрі аналітичної хімії ОНУ ім. І.І. Мечникова (науковий керівник – к.х.н., доцент Чеботарьов О.М.) та представлені у вигляді експресних, екологічно-доступних спектрофотометричних методик визначення в питній воді хрому, ванадію і марганцю, прийняті Центральною хіміко-бактеріологічною лабораторією (ЦХБЛ) ТОВ «ІНФОКС» філія «Інфоксводоканал» м. Одеса, для випробування їх аналітичних характеристик, валідації та впровадження у виробничу аналітичну практику.

Цей акт не передбачає фінансових зобов'язань і розрахунків між ОНУ ім. І.І.Мечникова та ТОВ «ІНФОКС» філія «Інфоксводоканал» м. Одеса

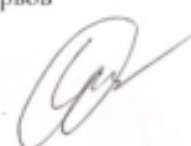
Начальник ЦХБЛ

к.х.н. А.А. Полищук



Зав. кафедри аналітичної хімії
ОНУ ім. І.І. Мечникова

к.х.н., доц. О.М. Чеботарьов



Приклад 18. Оформлення додатків (дисертація Рабошвіль К.В., 2020)

<https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/26954>

14. Дисертація оформляється відповідно до правил, наведених у [додатку 4](#) до вимог <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0155-17#n113>:

**ПРАВИЛА
оформлення дисертації**

Обсяг	Обсяг основного тексту дисертації визначається пунктами 10, 11 Порядку присудження наукових ступенів, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року № 567, або може встановлюватися освітньо-науковою програмою закладу вищої освіти (наукової установи) відповідно до специфіки відповідної галузі знань та/або спеціальності. До загального обсягу дисертації не включаються таблиці та ілюстрації, які повністю займають площу сторінки. Один авторський аркуш дорівнює 40 тис. друкованих знаків, враховуючи цифри, розділові знаки, проміжки між словами, що становить близько 24 сторінок друкованого тексту при оформленні дисертації за допомогою комп'ютерної техніки з використанням текстового редактора Word: шрифт - Times New Roman, розмір шрифту - 14 pt
Інтервал	Дисертацію друкують на одному або на двох (за бажанням) боках аркуша білого паперу формату А4 (210х297 мм) через 1,5 міжрядкового інтервалу
Шрифт	Кегель - мітел (14 типографських пунктів). Допускається підготовка дисертаційної роботи в форматі LaTeX з відповідним стильовим оформленням
Поля	Текст дисертації необхідно друкувати, залишаючи поля таких розмірів: ліве - не менше 20 - 25 мм, праве - не менше 10 мм, верхнє - не менше 20 мм, нижнє - не менше 20 мм

В ОНУ імені І.І. Мечникова всі дисертаційні роботи підлягають перевірці на наявність ознак плагіату згідно положенню «Про запобігання та виявлення академічного плагіату у освітній та науково-дослідній роботі учасників освітнього процесу та науковців Одеського національного університету імені І.І. Мечникова» (наказ №21-02 від 22.02.2018).

<http://onu.edu.ua/pub/bank/userfiles/files/chem/education/polozhennya-antiplagiat-22-02-2018.pdf>

Література та посилання

1. <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0155-17#Text>
2. <https://chem.lnu.edu.ua/research/scientific-council>
3. <https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/6193>
4. https://dspace.nuph.edu.ua/bitstream/123456789/13612/1/metod_rek_mendatsii_z_oformlennya_dusertatsijnuh_robit_ta_avtoreferativ.pdf
5. Пономаренко Л. Як підготувати і захистити дисертацію на здобуття наукового ступеня. Методичні поради / Автор-упор. Л. Пономаренко. – К.: Редакція "Бюлетеня Вищої атестаційної комісії України"; Толока, 2010. – 80 с.
6. Калусев А. В. Что полезно знать ученому перед тем, как писать свой труд. - Киев, 2001. 17.
7. Як правильно оформити дисертацію та документи атестаційної справи. 36. нормат. док. з питань атестації наук, кадрів вищої кваліфікації / Упоряд. Л. Мірошніченко. – К.: Толока, 2012. – 56 с.

Навчальне видання

**ПРАВИЛА ТА ОСОБЛИВОСТІ ОФОРМЛЕННЯ ДИСЕРТАЦІЙНОЇ
РОБОТИ З ХІМІЇ
ЗДОБУВАЧАМИ НАУКОВОГО СТУПЕНЯ ДОКТОРА
ФІЛОСОФІЇ (КАНДИДАТА НАУК)**

Методичні вказівки до курсу «Методи, аналіз та презентація результатів
наукових досліджень»
рівень вищої освіти третій (PhD)
спеціальність 102 «Хімія»

Підписано до друку 22.12.2020 р. Формат 60х84/16.
Папір офсетний. Гарнітура Times. Цифровий друк.
Ум. друк. арк. 2,55. Тираж 50. Замовлення № 2021-12.
Віддруковано з готового оригінал-макета.

Віддруковано з готового оригінал-макета.
Друкарня –«ТакиБук»
65101, Україна, м. Одеса, вул. Інглезі, 6/1
Телефони: Vodafone: +38 050 555-00-69
Intertelecom: +38 048 743-98-10
Email: takibook.odessa@gmail.com
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
ДК № 6424 від 04.10.2018 р