

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0301U000663

Державний реєстраційний номер: 0100U003272

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-04-2001

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Нейтронографічне дослідження 2-1 електролітів в неводних розчинниках

Початок етапу: 01.2000

Закінчення етапу: 12.2000

Вид звітнього документа: Без звіту

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 471255

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування:

Джерела фінансування

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Теоретичні основи цілеспрямованого використання неводних електролітних розчинів в електрохімічних пристроях і процесах

Назва роботи англійською:

A Theoretic Basis of the Purposeful Usage of Nonaqua Electrolyte Solutions in Electrochemical Devices and Processes

Реферат українською:

Об'єкт дослідження — метанол, розчини електролітів у метанолі. Мета роботи — дослідження впливу температури, заряду та розміру іона, а також природи іона та розчинника на структурно-динамічні характеристики міжчастинкових взаємодій симетричних та несиметричних електролітів в неводних розчинниках. Методи дослідження — нейтронографічний з використанням техніки ізотопного заміщення, комп'ютерного моделювання (метод молекулярної динаміки). З метою детального дослідження структури чистого метанолу на мікроскопічному рівні виконано його комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки при 298 К в NVE ансамблі з використанням 3-центрової моделі молекули. Встановлено, що така модель спроможна на якісному та кількісному рівнях відтворити експериментальні міжмолекулярні функції радіального розподілу X-X (X=C, O, H-methyl). Проведено експериментальне дослідження дифракції нейтронів в 1,4 моляльних розчинах NiCl₂ в дейтерованому метанолі. Із застосуванням різницевих методів першого, другого та більш високих порядків із ізотопним заміщенням нікелю, хлору та водню гідроксильної групи (HO) в поєднанні з ab initio квантово-хімічними розрахунками одержані функції радіального розподілу для пар атомів Ni-O, Ni-Cl та Ni-Ho. Визначені найбільш ймовірні міжатомні відстані, сольватні числа катіону та аніону та структура іонних асоціатів.

Реферат англійською:

Objects of investigation — methanol and electrolyte solutions in methanol. The aim of this work is studying of influence of temperature, ion charge and size, nature of ion and solvent on the structural-dynamical parameters of interparticle interaction in nonaqueous solutions of symmetrical and unsymmetrical electrolytes. Methods of neutron diffraction with isotopic substitution and molecular dynamics computer simulation were used. The microscopic structure of liquid methanol was studied in detail by performing of molecular dynamics computer simulations. Simulations were carried out at 298 K in NVE ensemble using two 3-site force field models. The ability of the 3-site model simulations to satisfactorily reproduce experimental X-X (X=C, O or H- a methyl hydrogen) intermolecular pair distribution functions was shown, Neutron diffraction measurements were carried out on 1,4 molal solutions of NiCl₂ in deuterated methanol. First-, second- and high-order difference methods with isotopic substitution on nickel, chlorine and hydroxyl hydrogen (HO) were applied in conjunction with ab initio calculations of Ni²⁺ - methanol complex to derive Ni-O, Ni-Cl, Ni-Ho Ni-C and Ni-H (methyl) pair radial distribution functions. Interatomic distances, coordination numbers of cation and anion, structure of ion complexes were determined..

Індекс УДК: 532:537.311.32;532:541.135.1, 532:541.135.1:541.13

Коди тематичних рубрик: 29.17.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: В'юник І.М.

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

IX. Бібліографічний опис

Kalugin O.N., Adya A.K. Microscopic structure of nickel(II) co-ordination shell in NiCl₂-methanol solution: neutron diffraction and ab initio studies // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2000. — V. 2. — P. 11-22. 2. Adya A.K., Kalugin O.N. Microscopic structure of Cl coordination shell in NiCl₂ methanol solution: A neutron diffraction study // J. Chem. Phys. — 2000. — V. 113, No. 11. — P. 4740-4749.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Залюбовський І.І.

Перелік осіб-виконавців

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності

