

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0203U008013

Державний реєстраційний номер: 0100U003272

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-04-2003

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження та моделювання температурно-концентраційної залежності питомої електричної провідності іон-молекулярних систем

Початок етапу: 01.2002

Закінчення етапу: 12.2002

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

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: диметилсульфоксид, розчини 1-1 та 2-1 електролітів в ДМСО, розчини LiBF₄ в ацетонітрилі, розчини 1-1 електролітів у розчинниках із низькою діелектричною проникністю. Мета роботи: дослідження та моделювання температурно-концентраційної залежності питомої електричної провідності та в'язкості електролітних розчинів. Метод дослідження: кондуктометрія, віскозиметрія. За результатами кондуктометричного експерименту визначені граничні молярні провідності та константи асоціації LiBF₄ в ацетонітрилі при 15-65 град. С. За їх допомогою та на основі аналізу температурно-концентраційних залежностей питомої електричної провідності встановлено, що температурна залежність останньої визначається, головним чином, температурною зміною граничної молярної електричної провідності, тоді як концентраційна залежність — зміною концентрації носіїв заряду. Розроблено та апробовано нову методику обробки кондуктометричних даних для 1-1 електролітів у розчинах з низькою діелектричною проникністю, яка враховує утворення іонних пар та іонних трійників. В роботі розв'язано наукову проблему вдосконалення та розвитку структурно-динамічних концепцій міжчастинкових взаємодій в неводних електролітних розчинах, завдяки чому значно розширено придатність аналітичних виразів концентраційних залежностей відносної динамічної в'язкості розчинів несиметричних та асоційованих електролітів, а також знайдено нові закономірності щодо впливу різних чинників на характер та інтенсивність міжчастинкових взаємодій у розчинах електролітів в апротонних розчинниках. Розроблена концепція динаміки іонної сольватації, відповідно з якою зміна мікрров'язкості розчину відбувається внаслідок модифікації його структури поблизу іона за рахунок специфічних короткодійних взаємодій останнього з молекулами розчинника. Розвинута концепція динамічної сольватації поширена на іонні асоціати, що дозволило вперше з віскозиметричних даних кількісно оцінити інтенсивність взаємодій іонних асоціатів 1-1 і 2-1 електролітів із найближчим молекулярним оточенням.

Реферат англійською:

Objects of investigation: dimethylsulphoxide, solutions of 1-1 and 2-1 electrolytes in : dimethylsulphoxide, solutions of LiBF₄ in acetonitrile, solutions of 1-1 electrolytes in solvents with low dielectric permittivity. The aim of this work is studying and modelling of temperature-concentration dependencies of the specific electric conductivities and viscosity of electrolyte solutions. Method of investigation: conductometry, viscosimetry. Limiting molar conductivities and ion association of LiBF₄ in acetonitrile at 15-65 grad. C are determined by results of conductometric experiments. With their help and on the basis of the analysis of temperature-concentration dependence of specific electrical conductance it is established, that its temperature dependence is determined mainly by the temperature change of the limiting molar conductivity, where as the concentration dependence is determined by the change of the ionic concentration. A new technique of conductometric data processing for 1-1 electrolytes insolutions with a low dielectric constant taking into account the formation of complex ionic species, ion pairs and ion triples is developed and tested. In the research the scientific problem of improvement and development of the structural-dynamic concepts of inter-particle interactions in non-aqueous electrolyte solutions is solved. Due to this the applicability of the analytical expressions for concentration dependence of the relative dynamic viscosity of solutions for unsymmetrical and associated electrolytes is considerably extended, and

also the new regularities of influence of the various factors on a character and intensity of inter-particle interactions in electrolyte solutions in aprotic solvents are found. The concept of ionic solvation dynamics is developed. In accordance with this concept the change of microviscosity of a solution occurs due to the modification of its structure in the vicinity of an ion as a result of specific short-range interactions of the latter with solvent molecules. The developed concept of dynamic solvation is extended for ionic complexes, that has allowed for the first time to evaluate quantitatively an intensity of interaction of ion complexes of 1-1 and 2-1 electrolytes with the nearest molecular environment from the viscosimetric data.

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.

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Калугін О.М. Мікроструктура, динаміка іонів і молекул та міжчастинкові взаємодії в неводних електролітних розчинах: комп'ютерне моделювання // Вісник Львівського ун-ту, серія хімічна. — 2002. — Вип. 42, ч. 1. — С. 63-65.

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**

