

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0302U005158

Державний реєстраційний номер: 0100U003272

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-03-2002

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Віскозиметричне дослідження неводних розчинів 1-1 та 2-1 електролітів в широкому інтервалі температур. Комп'ютерне моделювання рідких іон-молекулярних систем

Початок етапу: 01.2001

Закінчення етапу: 12.2001

Вид звітного 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 — диметилсульфоксид, розчини електролітів у диметилсульфоксиді. Мета роботи — дослідження впливу природи, заряду і розміру іона та температури на динамічні характеристики молекул розчинника, а також дослідження структури сольватних оболонок іонів у диметилсульфоксиді. Метод дослідження — молекулярно-динамічне моделювання. У роботі було розроблено, з використанням об'єктно-орієнтованого підходу на мові C++, програмний комплекс MDNAES, призначений для моделювання неводних розчинів електролітів, та методику їх молекулярно-динамічного дослідження. З єдиних позицій, в основу яких покладено апарат функцій радіального розподілу та концепція орієнтації характеристичних векторів, описана структурна організація ДМСО розчинів солей Li^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Cl^- , BPh_4^- та Me_4N^+ у ньому. Запропоновані моделі асоціата ДМСО, сольватних оболонок індивідуальних іонів, а також іонних пар (КІР та СРІП). Досліджено анізотропію обертальної та переорієнтаційної динаміки чистого ДМСО, а також вплив іонів на динаміку молекул розчинника. Моделі переорієнтації молекул ДМСО у сольватних оболонках іонів відображають особливості іон-молекулярних взаємодій в електролітних розчинах ДМСО. Моделі руху іонів у системах $\text{Na}-\text{Cl}$ – ДМСО та CaCl_2 – ДМСО побудовані на основі аналізу АКФ швидкостей іонів та відповідних спектрів загальмованих трансляцій. Проведено аналіз температурних змін структурної організації чистого ДМСО та нескінченно розведених розчинів, а також динаміки частинок у них. Одержані результати є принципово новими і дають можливість інтерпретувати експериментальні дані та робити теоретичні узагальнення щодо мікроскопічної структури та динаміки електролітних розчинів і можуть бути використані як довідкові дані.

Реферат англійською:

Objects of investigation — dimethylsulphoxide, electrolyte solutions in dimethylsulphoxide. The aim of this work is studying of influence of ion nature, charge and size and temperature on the dynamical properties of solvent molecules and investigation of the structure of ionic solvation shells in dimethylsulphoxide. Method of investigation — molecular-dynamics simulation. By using of object-oriented design and C++ language, there was developed the program package MDNAES, designed for simulation of nonaqueous electrolyte solutions, and principles of their molecular-dynamics simulations. The structure of DMSO and its solutions with Li^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Cl^- , BPh_4^- and Me_4N^+ is described by using common approach, based on radial distribution functions tool and a concept of characteristic vectors orientation. Models of a DMSO cluster, individual ions solvation shells and ion pairs, CIP andSSIP, are proposed. An anisotropy of rotational and reorientational dynamics of pure DMSO and influence of ions on solvent molecules dynamics are investigated. Models of DMSO molecules reorientation in solvation shells of ions reflect peculiarities of ion-molecular interactions in DMSO electrolyte solutions. Models of ionic motion in the systems $\text{Na}-\text{Cl}$ – DMSO та CaCl_2 – DMSO are constructed on the basis of analysis of ionic velocities ACF's and corresponding spectra of hindered translations. Analysis of temperature changes in structure of pure DMSO and its infinitely diluted solutions and particles dynamics in them was done.

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'юнник І.М.

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

1. Колесник Я.В., Калугин О.Н., Волобуев М.Н. Новый алгоритм интегрирования уравнений движения жестких многоатомных молекул в методе молекулярной динамики // Хим. физика. — 2001. — Т.20, № 3. — С. 14-19. 2. Adya A.K., Kalugin O.N., Volobuev M.N., Kolesnik Ya. V. Microscopic structure of liquid dimethyl sulphoxide and its electrolyte solutions: molecular dynamics simulations // Molec. Phys. — 2001. — V. 99, N 10. — P. 835-854.

X. Заклучні 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**

