

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0200U003538

Державний реєстраційний номер: 0197U008103

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-06-2000

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Динаміка іонної сольватації та міжчастинкові взаємодії в розчинах симетричних та несиметричних електролітів в неводних розчинниках

Початок етапу: 01.1999

Закінчення етапу: 12.1999

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

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:

Некулонівські міжйонні взаємодії в розчинниках з низькими та середніми діелектричними проникностями

Назва роботи англійською:

Nonculon interions interactions in solutions with low and middle dielectric conductance

Реферат українською:

Об'єкти дослідження - розчини симетричних та несиметричних електролітів в неводних розчинниках. Мета роботи - встановлення закономірностей впливу температури, заряду, розміру і природи іона, діелектричної проникності та хімічної природи розчинника на термодинамічні, структурні та динамічні характеристики іон-іонних та іон-молекулярних взаємодій в розчинах симетричних (1-1) та несиметричних (2-1) електролітів в неводних розчинниках. Методи дослідження - кондуктометрія, віскозиметрія, денсіметрія, комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки. Виміряна електрична провідність розчинів в різних розчинниках. Відпрацьовано методику та проведено розрахунки граничних молярних електричних провідностей та констант асоціації 1-1 електролітів в етилацетаті і суміші бутанол-октан з урахуванням утворення іонних трійників. Виміряна в'язкість розчинів в ДМСО при 298-343 К. Виконано дослідження впливу температури, заряду та природи іона і природи розчинника на динаміку міжчастинкових взаємодій в електролітних розчинах. Розраховані структурно-динамічні характеристики сольватації іонів в ДМСО при різних температурах. Встановлено різний вплив сольватації великих органічних іонів, одноатомних аніонів, одно- і двохзарядних катіонів s-елементів і двохзарядних катіонів d-елементів на структурно-динамічні характеристики в ДМСО. Проведено розрахунок структурних та динамічних характеристик першої і другої сольватної оболонки та об'єму розчинника в модельних системах. Одержані експериментальні дані є новими і можуть бути застосовані для теоретичного аналізу іон-іонних, іон-молекулярних та міжмолекулярних взаємодій, та як довідкові дані.

Реферат англійською:

Electric conductance of NaBPh₄, Bu₄NBr, Bu₄NBPh₄ solutions in acetone (278-318 K), LiClO₄, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄NClO₄ solutions in ethylacetate (278-318 K) and NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄NClO₄ solutions in butanol (50% mass) - water mixtures (298-368 K) was measured. The new method of conductance data processing was used, taking into account ion-triple formations. Limiting molar conductance and association constants for measured systems were calculated. Viscosities of solutions NaCl, NaBr, NaBPh₄, Bu₄NBr, CaCl₂, NiCl₂ and CdCl₂ in dimethyl sulfoxide were measured at 298-343 K. Values of B parameter of Jones-Dole equation were calculated to estimate influence of temperature and ion charge and size on interparticle interactions in solutions. There are three groups of ions divided by their influence on the solvation dynamics: a) large organic ions; b) single- and double-charged cations of s-elements and c) double-charged cations of d-elements. The series of molecular dynamics simulations was carried out for systems a) 216 dimethyl sulfoxide (DMSO) molecules; b) ion Na⁺ - 215 DMSO molecules; c) ion Ca²⁺ - 215 DMSO molecules; d) ion Cl⁻ - 215 DMSO molecules. The sets of structural and dynamic characteristics of first and second solvation shells were calculated for modeling systems.

Індекс УДК: 544.35, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.31

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

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

