

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0304U004161

Державний реєстраційний номер: 0103U004189

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-03-2004

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Потенціальні, електротранспортні та структурні характеристики іон-молекулярних систем

Початок етапу: 01.2003

Закінчення етапу: 12.2003

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: 705-12-54

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:

Структура, динаміка та міжчастинкові взаємодії в рідких неводних іон-молекулярних системах

Назва роботи англійською:

Structure, dynamics and interparticle interactions in liquid non-aqueous ion-molecular systems

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: сіль-сольватні системи, розчини LiTFSI у DME, розчини LiClO₄ та Bu₄NClO₄ у диметилформаміді. Мета роботи: Одержання надійної та детальної інформації з мікроскопічної структури, іонної динаміки та енергетики міжчастинкових взаємодій в рідких неводних іон-молекулярних системах (PHIMC) на основі солей літію та деяких 2-х зарядних катіонів за допомогою теоретичних (ab initio квантово-хімічні розрахунки) та експериментальних (кондуктометрія) методів з метою перевірки та вдосконалення теоретичних концепцій для опису практично важливих транспортних (електропровідність, дифузія, в'язкість) та електрохімічних властивостей PHIMC. Метод дослідження: кондуктометрія, квантово-хімічні розрахунки. Проведено квантово-хімічне дослідження координації та енергії міжчастинкових взаємодій в системі Li⁺ - TFSI⁻ - DME, а також комплексів [Li⁺ - TFSI⁻] та [Li⁺ - DME]. Встановлено, що для коректного розрахунку енергії утворення сольватоконкомплексів в рамках супрамолекулярного наближення слід враховувати суперпозиційну похибку. На підставі одержаних результатів передбачено, що у сіль-сольватній системі LiTFSI - DME повинні спостерігатися екстремуми на залежностях фізико-хімічних властивостей - склад при співвідношенні компонентів 1:1. За результатами кондуктометричного експерименту визначено граничні молярні провідності та константи асоціації для LiClO₄ та Bu₄NClO₄ у диметилформаміді в інтервалі температур 5-125 °C. Встановлено, що в LiClO₄ та Bu₄NClO₄ диметилформаміді у дослідженому концентраційному інтервалі є малоасоційованими електролітами. Із аналізу атракційних коефіцієнтів тертя встановлено, що найбільший вплив на динаміку найближчих до іону молекул розчинника справляє іон Li⁺, що узгоджується із величинами та температурними змінами радіусів сольватних оболонок іонів.

Реферат англійською:

Objects of investigation: salt-solvated systems, solutions of LiTFSI in DME, solutions of LiClO₄ and Bu₄NClO₄ in dimethyl formamide. The aim of this work is to obtain reliable and detailed information about microscopic structure, ionic dynamics and energetics of interparticle interactions in nonaqueous liquid ion-molecular systems (NLIMS) based on the salts of lithium and some double charged cations by means of theoretical (ab initio quantum-chemical calculations) and experimental (conductometry) methods for the purpose of validation and perfection of theoretical concepts for description of practically useful transport (conductance, diffusion, viscosity) and electrochemical properties of NLIMS. Methods of investigation: conductometry, quantum-chemical calculations. Quantum-chemical investigation of coordination and energy of interparticle interactions in the system Li⁺ - TFSI⁻ - DME and complexes [Li⁺ - TFSI⁻] and [Li⁺ - DME] were performed. It was established that for correct calculation of the formation energy of solvato-complexes within supramolecular approach one should take into account basis set superposition error. On the basis of obtained results it was predicted an existence of an extremum in dependencies composition vs. physicochemical properties in salt-solvated system LiTFSI - DME at the components ratio 1:1. Limiting molar conductivities and ion association constants of LiClO₄ and Bu₄NClO₄ in dimethyl formamide at 5-125 °C are determined by the results of conductometric experiments. It is established that LiClO₄ and Bu₄NClO₄ in dimethyl formamide are low associated electrolytes within investigated concentration range. On the basis of the analysis of the attraction friction coefficients it is shown that Li⁺ exerts the largest influence on dynamics of the nearest molecules, that agrees with values and temperature change of the radii of ions solvation shells.

Індекс УДК: 544.35, 541.8

Коди тематичних рубрик:31.15.31

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

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**

