Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U000783

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-04-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Горобець Маргарита Ігорівна

2. Gorobets Margaryta Igorivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 29-03-2016

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 21590307

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, бульв. Вернадського, 38-А

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д26.190.01

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 21590307

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, бульв. Вернадського, 38-А

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Вплив сольватації та природи йонних пар на електропровідність розчинів солей літію в диметилсульфоксиді, пропіленкарбонаті і диметилкарбонаті

2. Effect of solvation and the nature of ion pairs on the conductivity of lithium salt solutions in dimethyl sulfoxide, propylene carbonate and dimethyl carbonate

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено дослідженню йонно-молекулярного складу розчинів солей літію в диметилсульфоксиді (ДМСО), пропіленкарбонаті (ПК) та диметилкарбонаті (ДМК) в концентраційному інтервалі (0,05-0,25) м. ч., пошуку критеріїв утворення йонних пар і визначенню частинок, що відповідають за перенесення заряду. Вивчено фазові діаграми та залежності електропровідності для систем сіль літію - розчинник. Побудовано ряди аніонів за зменшенням асоціації з ДМСО і за збільшенням електропровідності та зроблено висновок, що як фазові діаграми, так і провідність однаково чутливі до всіх типів асоціації в системі. Визначено ентальпію асоціації рідкого ДМСО, яка становить -11,7 ± 0,9 кДж/моль. За результатами аналізу спектрів комбінаційного розсіювання (КР) ви-явлено, що у всіх досліджених розчинах середні числа сольватації катіонів постійні та близькі до двох. Середні числа сольватації аніонів зменшуються зі

збільшенням вмісту солі і наближаються до двох у концентрованих розчинах. Встановлено, що вміст сольватованих йонів, йонних пар, розділених роз-чинником, та контактних йонних пар від концентрації солі значно залежить від природи солі і розчинника. Знайдено, що в розчинах солей літію в ДМСО присутні як сольватовані йони, так і йонні пари всіх типів. Для систем LiClO4 - ПК та LiClO4 - ДМК встановлено, що в них сольватовані йони відсутні, а провідність забезпечується ІПРР. Зокрема, ряди розчинників за збільшенням концентрації сольватованих аніонів [ДМК=ПК(=0)<<ДМСО] і за зменшенням концентрації ІПРР [ДМК>ПК>ДМСО] при 0,075 м. д. збігаються з рядом розчинників за збільшенням провідності [ДМК<ПК<<ДМСО]. Таким чином, вперше показано, що ІПРР здатні виступати в ролі носіїв заряду в концентрованих розчинах.

2. The thesis deals with the study of speciation in lithium salts solutions in dimethyl sulfoxide (DMSO), propylene carbonate (PC) and dimethyl carbonate (DMC) in the concentration range of (0.05-0.25) mole fractions of a salt, searching for the criteria of the ion pair formation and understanding the nature of particles ensuring the transfer of charge. Phase diagrams and conductivity of lithium salt - solvent systems have been studied. The orders of anions for decreasing association of salts with DMSO and for increasing conductivity have been obtained. It is concluded that both phase diagrams and conductivity measurements are equally sensitive to all types of associations in the system. The enthalpy of association of liquid DMSO has been obtained as -11.7±0.9 kJ·mol-1. In Raman studies of cation and anion solvation, it has been found that in all solutions studied, solvation numbers of cations are constant and close to two. Solvation numbers of anions decrease if the salt content is growing and are close to two in concentrated solutions. The dependences of the amount of the solvated anions, the solvent separated ion pairs (SSIP) and the contact ion pair (CIP) on the salt concentrations have been determined to differ significantly from salt to salt and from one solvent to another. It has been found that solvated ions as well as all types of ion pairs are presented in lithium salts solutions in DMSO. No "free" ions exist for LiClO4 - PC and LiClO4 - DMC systems, and their conductance is solely ensured by SSIPs. Therefore, it has been shown for the first time that solvent separated ion pairs are able to serve as charge carriers in concentrated solutions.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кириллов Святослав Олександрович

2. Kirillov Sviatoslav Oleksandrovych

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колотілов Сергій Володимирович
2. Колотілов Сергій Володимирович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стрижакова Наталія Григорівна
2. Стрижакова Наталія Григорівна

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Кошечко Вячеслав Григорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Кошечко Вячеслав Григорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.