Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003281

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-10-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тимофєєв Михайло Васильович
2. Tymofieiev Mykhailo Vasylovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 21-09-2018

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Одеський національний університет імені І.І.Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська 2, м. Одеса, Одеська обл., 65058, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 41.051.04

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І.І.Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська 2, м. Одеса, Одеська обл., 65058, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І.І.Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська 2, м. Одеса, Одеська обл., 65058, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.31

Тема дисертації:

1. Статистична теорія розбавлених водно-спиртових розчинів

2. Statistical theory of dilute water-alcohol solutions

Реферат/анотація:

1. Роботу присвячено дослідженню рівняння стану водно-спиртових розчинів, зокрема його контракції – зменшенню об'єму розчину відносно сумарного об'єму його компонентів. Основна увага приділяється дослідженню структури мікроскопічних та усереднених потенціалів між компонентами розчину, а також природі водневих зв'язків у воді. У роботі побудовано мікроскопічні потенціали міжмолекулярної взаємодії в парах води і спиртів. Їх далека асимптотика відповідає мультипольному розкладу електростатичної взаємодії, а самі потенціали відтворюють основні характеристики димерів та другі віріальні коефіцієнти. Теплове обертання молекул призводить до самоусереднення потенціалів міжмолекулярної взаємодії за їх кутовими змінними. Термодинамічні властивості рідких і газоподібних води та спиртів в широкому інтервалі температур будуть визначатися усередненими радіально-симетричними потенціалами взаємодії. Усереднені потенціали отримано з вимоги, що усереднені і вихідні мікроскопічні потенціали взаємодії мають приводити до тих самих конфігураційних інтегралів в парному наближенні. Їх структура подібна до потенціалу Ленард-Джонса. Це обумовлює можливість застосування принципу подібності для визначення їх термодинамічних

властивостей. Показано, що принцип подібності дозволяє із задовільною точністю оцінити критичні температури води та метанолу, використовуючи аргон як базисну систему. Досліджується фізична природа водневого зв'язку в димерах води шляхом аналізу ступеня перекриття їх електронних оболонок. Отримано, що ступінь перекриття електронних оболонок не перевищує кількох відсотків. Це свідчить, що внесок обмінних ефектів має той самий порядок величини. Водневий зв'язок, таким чином, спричинений, головним чином, електростатичними силами. Для опису контракції та надлишкової ентальпії водно-спиртових розчинів застосовується рівняння стану, побудоване на основі віріального розкладу для тиску. Показано, що воно дозволяє відтворити найбільш загальні особливості поведінки контракції та надлишкової ентальпії водно-спиртових розчинів. Зокрема, у такий спосіб вдається відтворити положення, глибину та температурну залежність мінімуму для концентраційних залежностей контракції та надлишкової ентальпії, а також тангенси нахилів кривих контракції при малих частках води та спирту.

2. The present work is devoted to investigation of the equation of state for aqueous solutions of alcohol, in particular, contraction of water-alcohol solutions, i. e. a value of relative deviation of solution total volume from sum of volumes for its components. The main attention is focused on the investigation of microscopic and averaged interaction potentials between molecules for components as well as the nature of H-bonds in water. Microscopic potentials of interparticle interaction in water and methanol vapor are built. Their distant asymptotic corresponds to the electrostatic multipole expansion of interaction energy. They reproduce main characteristics of isolated dimers and virial coefficients of vapor phase. Thermal rotation of molecules leads to self-averaging of microscopic interaction potentials on their angular variables. The thermodynamic properties of water and alcohols in liquid and vapor phases in wide temperature range are determined by averaged interaction potentials. Averaged potentials are obtained from the requirement that initial microscopic and averaged potentials should lead to the same configuration integral in a pair approximation. It is found that their structures are similar to the Lennard-Jones potential. Thus, it is possible to apply the similarity principle to determine their thermodynamic properties. It is shown that the similarity principle allows to estimate the critical temperatures of water and methanol, using argon as a basic system with satisfactory accuracy. The physical nature of the H-bonds is investigated. For this purpose, the degree of overlapping for electron shells of molecules forming water dimers is analyzed. It had been shown that the overlapping degree of electron shells does not exceed several percent (less than 4%). This indicates that the exchange effects lead to the same contribution in order of magnitude to the H-bond energy. Therefore, the H-bond is mainly caused by electrostatic forces. To describe the contraction and excess enthalpy of water-alcohol solutions, an equation of state based on the virial expansion is used. It is shown, that it allows to reproduce the most general features of the contraction and excess enthalpy of water-alcohol solutions. In particular, in this way, it is possible to reproduce the position, depth and the temperature dependence of the minimum on the concentration curves, as well as slopes of the contraction curves at small molar fractions of water and alcohol.

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. Маломуж Микола Петрович
2. Malomuzh Nikolay Petrovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.14

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. Козловський Михайло Павлович
2. Kozlovskii Mykhailo Pavlovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

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. Сисоєв Володимир Михайлович
2. Sysoev Volodimir Mykhailovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.14

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. Храпатий Сергій Вікторович
2. Khrapatyi Serhii Viktorovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

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 Андрієвський Сергій Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Андрієвський Сергій Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.