Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0401U001098

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2001

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Волобуєв Максим Миколайович

2. Volobuyev Maksym Mykolajovych

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: 23-03-2001

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Харківський державний політехнічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02071180

Місцезнаходження: 61001, ДСП, м.Харків, вул.Фрунзе,21

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д64.051.14

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: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

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. Комп'ютерне моделювання диметилсульфоксиду та його електролітних розчинів методом молекулярної динаміки

2. Computer simulation of dimethylsulfoxide and its electrolyte solutions by molecular dynamics method

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: Структурні та динамічні аспекти сольватації у неводних розчинах Мета дослідження: Розвиток концептуальних уявлень про структурну організацію та динаміку молекул ДМСО в іон-молекулярних системах на підставі аналізу впливу на ці властивості типу іона та величини його заряду, а також температури і концентрації електроліта. Результати, новизна: 1)У роботі вперше запропонована та обгрунтована концепція основних та додаткових центрів координації іонів у молекулі розчинника. 2)Запропоновані моделі молекулярних асоціатів у ДМСО, а також моделі орієнтації молекул ДМСО у різних областях розчину. 3)Вперше описана геометрія розподілу центрів координації молекул ДМСО навколо іонів, що є принципово важливим для опису експериментальних даних ІЧ спектроскопії та електричної провідності. 4)Описані моделі переорієнтації молекул ДМСО та виявлено анізотропію переорієнтаційної та обертальної динаміки молекул розчинника. 5)Математичні моделі руху іонів описують особливості поведінки останніх у ДМСО. Галу зь використання: підбір матеріалів із зазделегідь заданими властивостями,

спецкурси з фізичної хімії та статистичної механіки.

2. Object of research: The structure and dynamical aspects of ionic solvation in nonaqueuos solutions. Aim of research: development of conceptions of structure organization and dynamics of DMSO molecules in ionic-molecular systems from the analysis of influence of ionic type and charge, temperature and electrolyte concentration on these properties. Results and novelty: 1)For the first time a conception of main and auxiliary ionic co-ordination centre of solvent molecule is proposed and proved. 2)The models of molecular clusters and of orientation of DMSO molecules in different regions of solution are proposed. 3)For the first time the geometry of distribution of DMSO molecule's co-ordination centres around the ions is elucidated, that is very important for interpretation of experimental data on IR spectroscopy and conductivity. 4)Models of reorientation of DMSO molecules are described, and the anisotropy of reorientational and rotational dynamics of solvent molecules is revealed. 5)Mathematical models of the ionic movement describe the behaviour of ions in DMSO. Sphere of usage: selection of materials with predicted properties, courses on physical chemistry and statistical mechanics.

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. Калугін Олег Миколайович

2. Калугін Олег Миколайович

Кваліфікація: к.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. Присяжний Віталій Дем'янович

2. Присяжний Віталій Дем'янович

Кваліфікація: д.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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Педаш Юрій Федорович

2. Педаш Юрій Федорович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Мчедлов-Петросян Микола Отарович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Мчедлов-Петросян Микола Отарович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.