Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U004774

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-07-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Махлайчук Павло Вікторович
2. Makhlaichuk Pavlo Viktorovich

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: 03-07-2020

Спеціальність за освітою:

Місце роботи здобувача: Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова. Наукова частина

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: 65082. м. Одеса, вул. Дворянська, 2

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): К 41.051.04

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: Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова. Наукова частина

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: 65082. м. Одеса, вул. Дворянська, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.17.19

Тема дисертації:

1. Роль водневих зв’язків у формуванні властивостей води.

2. Role of the hydrogen bonds in the formation of water properties.

Реферат/анотація:

1. Робота присвячується аналізу термодинамічних властивостей води на основі мікроскопічних уявлень про характер міжчастинкової взаємодії. В роботі запропоновано потенціал, в якому відштовхувальна та дисперсійна взаємодія описуються загальноприйнятими виразами, а електростатична частина моделюється відрізком мультипольного розкладу. Ретельно досліджено властивості димерів води. Показано, що можливе існування двох близьких за енергією конфігурацій димеру води. Оцінено величину внесків водневих зв'язків у потенціал взаємодії. Виходячи з експериментальних даних про теплоємність рідкої води та її пари побудовану їх кластерну структуру на лінії співіснування. Встановлено, що зі збільшенням температури у водяній парі зростає доля кластерів (димери, тримери, тетраметри і т.д.). З іншого боку, у рідкій воді характер кластеризації має протилежну поведінку. На основі запропонованого потенціалу побудовано усереднений потенціал міжмолекулярної взаємодії, який має структуру близьку до потенціалу Ленарда-Джонса. Показано, що основні термодинамічні величини визначаються саме усередненим потенціалом

взаємодії, що природно пояснюється квазі-вільним характером обертального руху молекул води.

2. The work is devoted to the analysis of the thermodynamic properties of water on the basis of the microscopic representation of the intermolecular interaction. Thereby an interaction potential based on the sum of the repulsive, dispersive (Van-der-Waals) and electrostatic terms as well as the actual energy of the hydrogen bond is constructed. The non-model potential is introduced, which has its electrostatic part represented as a multipole series while repulsive and dispersive terms take common expressions. The properties of water dimer are studied carefully. It is shown that there are two dimer configurations that have close ground state energies. The estimate value of the hydrogen bond contribution to the interaction potential is obtained. It is shown that H-bond energy does not exceed , where is the melting temperature of the hexagonal ice. Nevertheless, weak hydrogen bonds are fundamentally necessary for the qualitative description of the anomalous value of the heat capacity of water. Based on the structure of the introduced potential the averaged interaction potential is constructed. It is shown that in the liquid water and its vapor the averaged potential is satisfactorily approximated with the Lennard-Jones potential. All the main thermodynamic properties are determined with the averaged interaction potential. This fact is naturally confirmed by the quasi-free type of the thermal rotational motion of water molecules. From the experimental data for the heat capacity of water the picture of the cluster structure of its liquid and vapor states is obtained. It is shown that for the vapor on its coexistence curve the fraction of higher order clusters grows with the rise of the temperature. On the other hand the cluster structure of liquid water shows opposite behavior.

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 Mykola Petrovich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Козловський Михайло Павлович

2. Козловський Михайло Павлович

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. Лисецький Лонгін Миколайович

2. Лисецький Лонгін Миколайович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 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

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.