Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U004186

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-06-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ворошилова Юлія Володимирівна

2. Voroshylova Iuliia Volodymyrivna

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: 06-06-2013

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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: 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. Фізико-хімічні властивості та мікроструктура бінарних сумішей на основі імідазолієвих і піридинієвих іонних рідин з ацетонітрилом і метанолом

2. Physical and chemical properties and microstructure of binary mixtures based on imidazolium and pyridinium ionic liquids with acetonitrile and methanol

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: закономірності формування макроскопічних властивостей, у першу чергу транспортних, в іон-молекулярних системах як функції складу компонентів і зовнішніх термодинамічних параметрів, а також розвиток методів комп'ютерного моделювання невпорядкованих конденсованих систем. Мета дослідження: встановлення закономірностей впливу температури, розчинника, структури та природи протиіонів на фізико-хімічні властивості, структуру та міжчастинкові взаємодії у бінарних системах іонна рідина - молекулярний розчинник. Методи дослідження та апаратура: кондуктометрія, класичне і квантове молекулярно-динамічне моделювання, квантово-хімічні розрахунки; кондуктометр, аналітичні ваги, водні термостати, комп'ютери. Теоретичні і практичні результати: знайдені граничні молярні та іонні провідності та константи асоціації можуть бути використані як стандартні довідкові дані. Встановлені закономірності у взаємному впливі катіонів та аніонів іонних рідин дозволяють прогнозувати максимум електричної

провідності в сумішах іонних рідин з молекулярними рідинами, що є важливим для електрохімічного застосування. Отримані мікроскопічні дані можуть бути використані при розробці хімічних джерел струму та суперконденсаторів з поліпшеними експлуатаційними характеристиками. Розроблена методика генерування моделі силового поля і врахування зарядів на протиіонах може бути використана для будь-яких іонних рідин і сумішей на їх основі, що дозволить успішно моделювати подібні системи. Новизна: встановлено, що в усьому інтервалі складів - від чистих іонних рідин до їх нескінченно розведених розчинів - спостерігається один і той самий структурний мотив - контактна іонна пара іонної рідини з розташуванням аніона над імідазольним (піридиновим) кільцем катіона. Запропоновано нову універсальну методику розробки моделі силового поля для молекулярно-динамічного моделювання рідких середовищ з високою концентрацією електричного заряду, що враховує взаємну поляризацію в системі шляхом масштабування парціальних зарядів на атомах взаємодіючих іонів. Показано, що положення та величина максимуму на залежності питомої електричної провідності від мольної частки іонних рідин у сумішах з молекулярними розчинниками залежить від розміру катіона й аніона іонної рідини і пояснюється досягненням концентрації, за якої іони в системі вступають в контакт з утворенням складних асоціатів (кластерів). Ступінь упровадження: методичні та розрахункові підходи до врахування поляризаційних ефектів у високополяризованому середовищі впроваджені в навчальний процес хімічного факультету у рамках спеціального курсу: "Молекулярно-динамічне моделювання конденсованих невпорядкованих систем" за спеціальністю "Комп'ютерна хімія та молекулярний дизайн" для студентів 5-го курсу хімічного факультету за ОКР "Магістр" та "Спеціаліст". Сфера використання: результати можуть бути використані в наукових лабораторіях, які розробляють хімічні джерела струму.

2. Object of investigation: regularities in formation of macroscopic properties, especially transport, in ion-molecular systems as a function of external components and thermodynamic parameters as well as the development of computer simulation methods for disordered condensed systems simulation. Objective: To elucidate the influence of temperature, solvent, structure and nature of counterions on the physical and chemical properties, structure and interparticle interactions in binary systems ionic liquid - molecular solvent. Methods and apparatus: conductometry, classical and quantum molecular dynamics simulation, quantum-chemical calculations, conductimeter, analytical balance, water thermostats, computers. Theoretical and practical results: found limiting molar conductivity and ion association constant can be used as standard reference data. The regularities in the mutual influence of cations and anions of ionic liquids to predict the maximum electrical conductivity of mixtures of ionic liquids with molecular liquids have been found, which is important for electrochemical applications. These microscopic data can be used to develop chemical power sources and supercapacitors with improved performance. The technique to develop a force field model and counterions charges account can be used for any ionic liquids and their mixtures. Proposed approach allows simulate such systems successfully. Novelty: it has been found that throughout the composition range - from pure ionic liquids until infinitely diluted solutions - observed the same structural motif - contact ion pair of ionic liquid with a anion above the imidazolium (pyridinium) ring of cation. A new method of developing a universal force field model for molecular dynamic simulation of liquid media with a high concentration of electric charge which takes into account the mutual polarization of the system by scaling the partial charges on the atoms interacting ions. It is shown that the position and size of the maximum on the dependence of specific electrical conductivity on ionic liquid mole fraction in their mixtures with molecular solvents depends on the size of the cation and anion and reflacts the concentration at which the ions in the system come in contact with the formation of the complex associates (clusters) . Degree of implementation: methodological and computational approaches to take into account polarization effects in highly polarized environment embedded in the learning process on chemical department as part of a special course "Molecular dynamics simulation of condensed disordered systems" for specialty "Computational chemistry and molecular design" for "Master" and "Specialist" students of chemistry of 5th year. Area: results can be used in laboratories, which develop chemical current sources.

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. Kalugin Oleg Mykolayovych

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. Омельчук Анатолій Опанасович
2. Омельчук Анатолій Опанасович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.05

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. Булавін Віктор Іванович

2. Булавін Віктор Іванович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Орлов Валерій Дмитрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов Валерій Дмитрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.