Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U101952

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-11-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гвоздь Марта Валентинівна

2. Hvozd Marta V.

Кваліфікація: 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.24

Назва наукової спеціальності: Фізика колоїдних систем

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 05-11-2020

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

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): Д 35.156.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.03

Тема дисертації:

1. Фазова поведінка іонних розчинів в об'ємі та в пористому середовищі: Примітивна модель з явним врахуванням розчинника

2. Phase behavior of ionic solutions in the bulk and in a porous media: Primitive model with the explicit consideration of solvent

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню фазової поведінки іонних розчинів з явним врахуванням анізотропного розчинника в об'ємі та в невпорядкованому пористому середовищі. Система представлена моделлю, що включає дві підсистеми: (i) іонна система заряджених твердих сфер HS (RPM модель); (ii) модель твердих сфероциліндрів HSC. Невпорядковане пористе середовище представлене замороженою матрицею випадково розміщених твердосферних частинок. Як перший крок, досліджено систему відліку, якою виступає HS/HSC суміш. Для її опису узагальнено теорію масштабної частинки SPT і проведено дослідження фазової поведінки суміші в об'ємі. Для такої моделі має місце ізотропно-нематичний фазовий перехід: при певних концентраціях кожної із компонент через орієнтаційне впорядкування твердих

сфероциліндричних частинок спостерігається формування нематичної фази, коли анізотропні молекули орієнтуються вздовж певного напрямку. З біфуркаційного аналізу нелінійного інтегрального рівняння для унарної орієнтаційної функції розподілу побудовано фазові діаграми співіснування ізотропної і нематичної фаз. Збільшенння концентрації твердих сфер зсуває область співіснування в сторону менших значень густин твердих сфероциліндрів. Зі збільшенням розмірів твердих сфер область співіснування розширюється, а зі збільшенням упаковки твердих сфер — звужується. Використовуючи теорію SPT, досліджено фазову поведінку даної HS/HSC суміші в невпорядкованому пористому середовищі. Для опису системи застосовано два підходи: (i) біфуркаційний аналіз нелінійного інтегрального рівняння на унарну орієнтаційну функцію розподілу; (ii) термодинамічний підхід, який грунтується на умовах фазової рівноваги. В рамках біфуркаційного аналізу показано, що збільшення упаковки матриці зсуває область співіснування ізотропної і нематичної фаз в сторону менших значень упаковки суміші, при цьому область співіснування стає вужчою. В рамках термодинамічного підходу показано, що в HS-HSC суміші при певних концентраціях твердих сфер спостерігається тенденція до розшаруванн, яка проявляється у виникненні нематичної фази, збагаченої твердими сфероциліндрами та ізотропної фази, збагаченої твердими сферами. Досліджено фазову поведінку іонного плину з явним врахуванням нейтрального анізотропного розчинника в об'ємі. Іонний плин задається обмеженою примітивною моделлю RPM, яка складається з однакової кількості позитивно і негативно заряджених твердих сфер однакових розмірів. Анізотропний розчинник моделюється твердими сфероциліндрами. Для опису термодинамічних властивостей системи відліку поєднано теорію SPT та асоціативне середньосферичне наближення AMSA. Вивчається вплив несферичності молекул розчинника на фазову поведінку "рідина—рідина" системи RPM-HSC шляхом розгляду "еквівалентної" суміші RPM-HS, у якій HS частинки розчинника мають такий же об'єм як HSC частинки в моделі RPM-HSC. Для дослідження асоціації між іонами порівнюються результати, отримані в наближеннях AMSA і MSA. Показано, що завдяки врахуванню асоціативних міжіонних ефектів у рамках AMSA, на відміну від MSA, несферичність молекул розчинника може суттєво міняти фазову діаграму іонного плину через доданок від закону діючих мас, що визначається контактним значенням бінарної функції розподілу іонів. Використовуючи поєднанання теорії SPT і наближення AMSA, досліджено фазову поведінку іонного плину з явним врахуванням нейтрального анізотропного розчинника у невпорядкованому пористому середовищі. Показано, що пориста матриця сприяє орієнтаційному впорядкуванню сфероциліндрів у збагаченій розчинником фазі та зсуває область співіснування в сторону менших густин та вищих температур. Збільшення несферичності частинок розчинника розширює область фазового співіснування і зсуває в сторону вищих температур. Збільшення тиску в системі сприяє зміщенню області фазового співіснування "рідина—рідина" в сторону вищих температур і більших густин. Досліджено, що невпорядковане пористе середовище знижує ступінь дисоціації іонів. Виявлено, що ступінь дисоціації вздовж кривих співіснування у збагаченій розчинником фазі є менший, ніж у збагаченій іонами фазі. Це означає, що спарюювання іонів відбувається більшою мірою у збагаченій розчинником фазі. Ця робота — перше теоретичне дослідження іонних плинів, коли вивчається вплив анізотропності розчинника на фазову поведінку системи, і, на додаток до цього, вплив невпорядкованого пористого середовища.

2. The thesis is devoted to the study of the phase behavior of ionic solutions with the explicit consideration of anisotropic solvent molecules in the bulk and in a disordered porous media. The system is represented by a model that includes two subsystems: (i) ionic system of charged hard spheres (HS); (ii) model of hard spherocylinders (HS). A disordered porous media is represented by a quenched configuration of randomly distributed HS that form so-called matrix. The generalization of the scaled particle theory (SPT) is used to describe the phase behavior of a binary HS/HSC mixture in the bulk. For such a model there is an isotropic-nematic phase transition. Due to the orientational ordering of HS particles the formation of a nematic phase is expected at certain concentrations of mixture components. In this case anisotropic molecules are oriented along a certain direction. Phase diagrams of the coexistence of isotropic and nematic phases are constructed from the bifurcation analysis of the nonlinear integral equation for the singlet orientation distribution function. It is shown that the presence of HS shifts the phase transition to the lower densities of HSC. With increasing of the sizes of HS the coexistence region is

expanded and with increasing of the packing fraction of HS the coexistence region becomes narrower. To study the phase behavior of HS/HSC mixture confined in a disordered porous media, we propose an extention of the SPT. Two approaches are used to describe such a system: (i) bifurcation analysis of a nonlinear integral equation for a singlet orientation distribution function; (ii) a thermodynamic approach based on phase equilibrium conditions. The bifurcation analysis shows that the increasing of the packing fraction of matrix shifts the coexistence region of the isotropic and nematic phases towards lower packing fraction of a mixture, and the coexistence region gets narrower. In the framework of thermodynamic approach it was shown that at certain concentrations of HS particles the demixing processes occur in the coexisting phases, leading to the nematic phase rich in HSC and the isotropic phase rich in HS. We have studied the phase behavior of the explicit solvent model represented as a mixture of the restricted primitive model (RPM) of ionic fluid and neutral solvent particles (HSC) in the bulk. RPM is represented by equal number of equisized positively and negatively charged HS. To this end, we combine two theoretical approaches, i.e., SPT and the associative mean spherical approximation (AMSA). The effect of asphericity of solvent molecules on the fluid-fluid phase transition is studied by considering an “equivalent” mixture in which the HSC are replaced by HS of the same volume. To study an ion association phenomena on the phase behavior of RPM-HSC and RPM-HS models, we also use the mean spherical approximation (MSA) for comparison. It is shown that due to the mass action law term (MAL) in the AMSA, in contrast to MSA, the asphericity of solvent molecules can significantly changes the phase diagram of the ionic solution. Moreover, the MAL contribution depends on the contact value between ionic particles. To study the phase behaviour of ionic solutions confined in a disordered porous media with the explicit neutral anisotropic solvent, we combine SPT and the AMSA approximation. It was shown that porous matrix favours orientation ordering of HSC in solvent-rich phase. Due to a disordered porous media a coexistence region shifts towards lower number densities and towards higher temperatures. Asphericity of HSC makes a region of phase coexistence wider and shifts towards higher temperatures. The increase of pressure leads shifts coexistence region towards higher densities and higher temperatures. It was found that the degree of ion dissociation along the coexistence curves in the solvent-rich phase is smaller than in the ion-rich phase. It means that the pairing of oppositely charged ions is more preferable for solvent-rich phase. The presence of disordered porous media lowers the degree of ion dissociation. This work is the first theoretical study of ionic solutions, which describes the effect of anisotropy of solvent particles, and, in addition, the effect of a disordered porous medium on the phase behavior of the system.

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. Головко Мирослав Федорович

2. Holovko Myroslav

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. Лебовка Микола Іванович

2. Lebovka Mykola I.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костробій Петро Петрович

2. Kostrobij Petro

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 Мриглод Ігор Миронович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Мриглод Ігор Миронович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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