Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0415U004256

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-07-2015

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пальваль Ірина Миколаївна

2. Palval Iryna Mikolayvna

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: 30-06-2015

Спеціальність за освітою: 7.070301

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:

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

Тема дисертації:

1. Іонна асоціація пікратів з катіонами різної природи в розчинниках з низькою та середньою діелектричною проникністю

2. Ionic association of picrates with cations of different nature in solvent with low and medium dielectric permittivity

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена пошуку адекватних моделей опису іонних рівноваг за даними кондуктометрії в розчинах електролітів в апротонних середовищах із низькою та середньою діелектричною проникністю. Для вивчення обрано солі пікринової кислоти: пікрати тетра-н-бутиламонію, тетраетиламонію, цетилтриметиламонію, N-цетилпіридинія та калію. Як розчинники використано переважно суміші ацетону з н-бутилацетатом та н-гексаном. На прикладі пікрату тетра-н-бутиламонію в системах ацетон-н-бутилацетат та ацетон-н-гексан в інтервалі від 20,56 до 4,99 та концентрацій від 0,3 10-4 до 7,8 10-2 М реалізована модель опису іонних рівноваг в розчинниках з ? 7 із урахуванням утворення іонних трійників. У моделі для обробки даних кондуктометрії поєднано підхід Ходжо з рівнянням Лі-Уітона. Фореограми пікратів вивчених іонів при = 8,8 - 9,1 описуються майже однаково успішно як із урахуванням іонних трійників, так й без них. Доведено зниження добутку Вальдена при варіюванні складу змішаного розчинника при < 7. Запропоновано засіб

додаткової перевірки правильності значення константи асоціації при спільному розрахунку з іншими параметрами (гранична молярна електропровідність, константи утворення трійників та квадруполів) при низьких значеннях . Засіб полягає в екстраполяції в межах бінарної системи розчинників залежності , лінійної в області домінування даної рівноваги, до низьких значеннь . За допомогою методу спектрофотометрії в бінарних розчинниках із = 9,07 та 12,54 одержано константи асоціації іона пікрату з іонами K+ та n-Bu4N+, які співпадають зі значеннями, знайденими кондуктометричним методом. Зсув змуги поглинання іона пікрату при асоціації з катіонами металів складає 20 та більш нанометрів, з'являється другий максимум, характерний для іонних асоціатів. За впливом неорганічних солей на зсув смуги поглинання іон пікрату катіони металів розташовуються в наступний ряд: Th4+ > La3+ > Mg2+ > Li+ > Na+ > Pb2+

2. The study has been devoted to the search of adequate models for describing ionic equilibria with the help of conductance in aprotic media with low and medium dielectric permittivity. The salts of the picric acid have been chosen for this research, namely, tetra-n-butyl, tetraethyl, cetyltrimethyl, N-cetylpyridinium, and potassium picrates. In the most cases, the mixtures of acetone with n-butylacetate and n-hexane have been used as solvents. Using tetra-n-butylammonium picrate and acetone-n-butylacetate and acetone-n-hexane as examples of an electrolyte and solvents with of 20,56 to 4,99 respectively, the model was developed for describing ionic equilibrium within the concentration range of 0,3 10-4 to 7,8 10-2 M. This model unifies the approach by Hojo and the Lee-Wheaton equation. At ? 7, the existence of ionic triplets is necessary for adequate description of the equilibria, whereas the phoreograms at = 8,8 - 9,1 may be interpreted practically equal either with taking inter the consideration the ionic triplets or without them. On the drop of the polarity up to < 7, the decrease in the Walden product has been revealed. For media with low values, a procedure for additional checking of the correctness of the joint calculation of the association constants of ion pairs, triplets, quadruples, and limiting conductivities has been developed. The approach consists in the extrapolation of the linear dependence in the given binary mixtures to the low values. In binary mixed solvents with = 9,07 and 12,54, the association constants of picrates with the cations K+ and n-Bu4N+ have been estimated via the spectrophotometric method. These values coincide with those determined by conductance. The shift of the absorption band of the picrate anion originating from the association with metal cations makes up 20 nm or even more, and a new maximum, typical for ionic associates, appears. According to the influence of the inorganic salts upon the band position of picrates, the cations may be arranged in the following sequence: Th4+ > La3+ > Mg2+ > Li+ > Na+ > Pb2+.

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. Мчедлов-Петросян Микола Отарович

2. Mchedlov-Petrossyn Nikolay Otarovich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тарасенко Юрій Олександрович

2. Тарасенко Юрій Олександрович

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

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чергинець Віктор Леонідович

2. Чергинець Віктор Леонідович

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 Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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