Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U001858

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-05-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колесник Ярослав Валентинович
2. Kolesnik Yaroslav Valentinovich

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: 15-04-2005

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: 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. Мікроструктура та динаміка електролітних розчинів на основі ацетонітрилу та метанолу: молекулярно-динамічне моделювання

2. Microscopic structure and dynamics of electrolyte solutions in acetonitrile and methanol: molecular dynamics simulation

Реферат/анотація:

1. Об’єкти дослідження: розчини LiClO4, LiBF4 і LiBr в ацетонітрилі та метанолі. Мета: розвиток модельних уявлень і теоретичних концепцій структурно-динамічних властивостей розчинів літієвих солей в ацетонітрилі та метанолі на мікроскопічному рівні в залежності від температури, концентрації електроліту та природи аніону. Метод: молекулярно-динамічне моделювання. Запропоновано моделі геометрії ПСО іонів Li+, ClO4−, BF4− і Br− в ацетонітрилі та метанолі та моделі іонних пар LiClO4 у метанолі. Запропоновано аналітичні моделі для опису АКФ лінійної швидкості та спектрів загальмованих трансляцій молекул AN та MeOH й іонів Li+ і ClO4− в безмежно розведених розчинах. Встановлено характер впливу іонів на молекули в їхніх сольватних оболонках. Впровадження: використання отриманих мікроскопічних характеристик динаміки та структури для прогнозування практично важливих властивостей електролітних розчинів (електрохімія)

2. Objects of investigation: solutions of LiClO4, LiBF4 and LiBr in acetonitrile and methanol. Aim of investigation: development of the model insight and theoretical conceptions of structure and dynamical properties of lithium salts solutions in acetonitrile and methanol on microscopic level, depending on temperature, electrolite concentration and anion. Method: molecular dynamics simulation. Models of geometry of first solvation shells of Li+, ClO4−, BF4− and Br− in acetonitrile and methanol and of ion pairs in methanol were proposed. Analytical models for describing linear velocity ACF and constrained translations spectra of AN and MeOH molecules and of Li+ and ClO4− ions in infinitely diluted solutions were proposed. Characteristics of influence of Li+, ClO4−, BF4− and Br− ions on the dynamics of acetonitrile and methanol molecules in their solvation shells were ascertained. Application: utilization of obtained microscopic dynamic and structural properties for prediction of practically useful properties of electrolyte solutions (electrochemistry)

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 О.М.
2. Kalugin O.N.

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. Казіміров В.П.

2. Казіміров В.П.

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. Іванов В.В.

2. Іванов В.В.

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 В.Д.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов В.Д.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.