

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U004859

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-11-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зелінський Сергій Олександрович

2. Zelinsky Sergiy Alexanrovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 28-10-2008

Спеціальність за освітою: 8.070101

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

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 26.001.08

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

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. Вплив тиску та температури на термодинамічні властивості розчинів гліцерин-вода
2. The pressure and temperature influence on thermodynamically properties in glycerol-water solution

Реферат:

1. Дисертація присвячена дослідженню зв'язку термодинамічних властивостей з молекулярною структурою розчинів гліцерин-вода, води та гліцерину в широкому інтервалі зміни тиску та температури. Для цього було: експериментально отримано дані з густини вздовж лінії рівноваги рідина-пара для води та розчинів гліцерин-вода в інтервалі температур 289K - 357K.; методом сільфоного п'езометра з диференціальним трансформаторним датчиком лінійних зміщень отримано P-V-T дані в інтервалі тисків 0.1МПа - 103МПа та температур 293K-375K; розраховано методами чисельного диференціювання та інтегрування ізотермічний модуль пружності, коефіцієнт теплового розширення, ізобаро-ізотермічні прирости потенціалу Гіббса, ентропії, внутрішньої енергії та ентальпії для води та збагачених водою розчинів гліцерин-вода в досліджуваному інтервалі температур та тисків; методом молекулярної динаміки проведено розрахунок молекулярної структури води, гліцерину та розчину 0.27м.д. гліцерину у воді при T=300K і T=354K та тисках

0.1МПа і 100МПа.Проведені дослідження показали що, на концентраційній залежності густини розчинів гліцерин-вода при концентрації 0.33м.д. гліцерину існує стрибок густини, що пов'язаний з проникненням двох молекул води в структуру молекули гліцерину. Спостережено для розчинів гліцерин-вода з вмістом гліцерину менше 0.33м.д. існування максимуму на температурній залежності модуля пружності при температурі 320К в інтервалі тисків 0.1МПа - 103МПа. а також особливість баричної залежності коефіцієнта теплового розширення. Показано існування межової концентрації (0.33м.д. гліцерину), до якої в розчинах гліцерин-вода зберігаються структурні особливості подібні до структурних особливостей води. Ця межа концентрація гліцерину зменшується в розчинах гліцерин-вода при збільшенні тиску. Результати МД моделювання функції густини ймовірності атом-атомного розподілу та кутового розподілу водневого зв'язку показали, що у воді кількість водневих зв'язків зменшується при збільшенні тиску та додавання до неї гліцерину. При цьому кут О-Н...О у воді зменшується, а відстань між атомами кисню збільшується. В гліцерині навпаки, збільшення тиску призводить до збільшення кількості водневих зв'язків. Показано, що отримані P-V-T дані описуються напівемпіричним рівнянням стану Тейта, яке адекватно передає особливості термобаричних залежностей модуля пружності і коефіцієнта теплового розширення.

2. The thesis concerns the research of thermodynamic properties and their connection with structure of water, glycerol and glycerol-water solutions in wide range of temperature and pressure. We make next steps for decision of this task: The density of glycerol-water solutions containing from 0.22 to 0.55 mole fraction of glycerol were measured by using the picnometer method in the range of temperature from 293 K to 357K along of the coexistence curve. The same measurements were carried out for double distilled water and single-component glycerol. The P-V-T data of water rich solutions has been made by the bellow method in the wide temperature range (from 293K to 375K) and pressure range (from 0.1 MPa to 103 MPa). We obtain the value of modulus of elasticity, isobaric coefficient of thermal expansion, the increments of the entropy, Gibbs energy, whole inner energy and enthalpy by numerical differentiation and integration in the investigation range of temperature and pressure. We carried out the molecular dynamic simulation on liquid water, liquid glycerol and glycerol-water solution with concentration of 0.27 mole fraction of glycerol at temperature $T=300K$ and $T=354K$ and pressure 0.1MPa and 100MPa. The result shows that the jump of density exists on the coexistence curve. The position of this jump located at 0.33 mole fraction of glycerol. The position of the density jump is the same for all investigated temperatures. This behavior we explain by integration of two molecules of water into molecule of glycerol. We observed the maximum of modulus of elasticity from temperature if concentration of glycerol in glycerol-water solution is less than 0.33 mole fraction of glycerol at 320K. Also we have found the singularity of isobaric coefficient of thermal expansion in this range of concentration. It was found that in water rich solutions below the boundary concentration (0.33 mole fraction of glycerol) the behaviors of modulus of elasticity and isobaric coefficient of thermal expansion are determinate only by structural singularity of water. This boundary concentration decrease if increase pressure. The number of hydrogen bonds, value of hydrogen bond angles and pair atom-atom correlation functions was determined in water, glycerol and 0.27mole fraction of glycerol by method of MD simulation. It was demonstrated that when pressure and concentration of glycerol are increasing then the number of hydrogen bond and value of hydrogen bonds angles are decreasing and that the network of hydrogen bond are destroyed in water. But this behavior didn't common for all hydrogen bonding liquids, because when pressure increase the number of hydrogen bond in glycerol is increasing. The Tait equation of state is applicable to describe the P-V-T data of our solution. This equation describes a behavior of modulus of elasticity and isobaric coefficient of thermal expansion completely.

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. Адаменко Ірина Іванівна

2. Adamenko Irina Ivanovna

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маломуж Микола Петрович

2. Маломуж Микола Петрович

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. Погорелов Валерій Євгенійович

2. Погорелов Валерій Євгенійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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**

Булавін Леонід Анатолійович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Булавін Леонід Анатолійович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Т.А.