# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0415U003998

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 14-07-2015

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Черножук Тетяна Василівна

2. Chernozhuk Tetiana Vasylivna

**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:** 27-06-2015

**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:** 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

**Тема дисертації:**

1. Електрична провідність, сольватація та міжчастинкові взаємодії в розчинах літієвих солей в г-бутиролактоні, пропіленкарбонаті та його сумішах з 1,2-диметоксиетаном

2. Electrical conductivity, solvatation and interparticle interactions in lithium salts solutions in g-butyrolaktone, propylene carbonate and a mixtures of propylene carbonate with 1,2-dimethoxyethane.

**Реферат/анотація:**

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню вплива температури, природи розчинника, природи та розміру іонів на характеристики міжчастинкових взаємодій, електричну провідність та іонну сольватацію, термодинаміку іонної асоціації в розчинах 1-1 електролітів в пропіленкарбонаті, г-бутиролактоні та сумішах на основі пропіленкарбонату з 1,2-диметоксиетаном. За результатами комплексного дослідження обраних іон-молекулярних систем методами діелькометрії, кондуктометрії, молекулярно-динамічного моделювання та теоретичного статистико-механічного опису запропоновані підходи, що дозволяють прогнозувати граничну молярну провідність іонів і термодинамічні характеристики іонної асоціації. Встановлено суттєву різницю в температурній залежності добутку Писаржевського-Вальдена для однозарядних іонів в г-бутиролактоні, пропіленкарбонаті та його сумішах з 1,2-диметоксиетаном. На прикладі пропіленкарбонату з використанням експериментальних даних з граничної молярної іонної провідності та результатів класичного

молекулярно-динамічного моделювання встановлено мікроскопічну природу сольвофільної сольватації катіону літію та сольвофобної сольватації катіону тетрабутиламонію в апротонних диполярних розчинниках. За результатами аналізу масиву власних та літературних даних з констант асоціації 1-1 електролітів в неводних розчинниках в рамках статистико-механічного опису іонної асоціації з використанням моделі Раманасана-Фрідмана запропоновано універсальну методику прогнозу констант асоціації 1-1 електролітів в неводних розчинниках в широкому інтервалі температур.

2. The regularities peculiarities of the effect of temperature, nature of solvent, nature and size of ions on the characteristics of interparticle interactions, electrical conductivity and ion solvation, thermodynamics of ionic association in solutions of 1-1 electrolytes in propylene carbonate, g-butyrolactone and propylene carbonate-based mixtures with 1,2-dimethoxyethane were elucidated. According to the results of a comprehensive study of the selected ion-molecular systems by the methods of dielcometry, conductometry, molecular dynamics simulation and theoretical statistical mechanics description, the method for prediction of the limiting ion molar conductivity and thermodynamic characteristics of ionic association have been offered. An essential difference in the temperature dependence of the Pisarzhevskyi-Walden product for singly charged ions in g-butyrolactone, propylene carbonate and its mixtures with 1,2-dimethoxyethane has been established. The microscopic nature of solvophilous solvation of lithium cation and solvophobous solvation of tetrabutylammonium cation in aprotic dipolar solvents was elucidated on the example of propylene carbonate using experimental data on the boundary molar ionic conductivity and the results of classical molecular dynamics simulation. The analysis of an array of own and literature data on the association constants of 1-1 electrolytes in non-aqueous solvents within the statistical mechanics description of ionic association with the use of the Ramanathan-Friedman model allowed offering a universal method for predict in of association constants of 1-1 electrolytes in non-aqueous solvents in a wide temperature range.

**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 Mykolajovych

**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. 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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Третьяков Дмитро Олегович
2. Третьяков Дмитро Олегович

**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** 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.