Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003195

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-07-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гвоздь Тарас Валентинович

2. Hvozd Taras V.

Кваліфікація:

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: 26-06-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 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 НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 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 НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 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: 29.17.31, 29.17.41, 31.15.37, 31.15.03

Тема дисертації:

1. Статистико-механічний опис фазової поведінки полідисперсних колоїдних і полімерних систем в об'ємі та у пористому середовищі

2. Statistical mechanical description of the phase behavior of polydisperse colloidal and polymer systems in bulk and porous media

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню фазової поведінки, а також ефектів фракціонування між фазами частинок полідисперсних колоїдних і полімерних систем в об'ємі та у невпорядкованому пористому середовищі. Основною проблемою для теоретичного опису фазової поведінки полідисперсних сумішей є функціональна залежність вільної енергії Гельмгольца системи від функції розподілу по сортах. Як результат, умови фазової рівноваги формулюються як система нескінченної кількості рівнянь, тобто хімічний потенціал для кожного значення неперервного індексу сорту повинен бути однаковий в кожній співіснуючій фазі. Отримати розв'язок такої системи рівнянь для вільної енергії Гельмгольца довільної форми є практично неможливо. В дисертаційній роботі узагальнено та застосовано схему, яка була розвинена для обчислення фазових діаграм полідисперсних сумішей, які описуються моделями обрізаної вільної енергії (ОВЕ), тобто моделями, вільна енергія Гельмгольца яких визначається скінченним числом узагальнених моментів функції

розподілу по сортах. Остання особливість моделей з ОВЕ дозволяє сформулювати умови фазової рівноваги як систему скінченної кількості рівнянь для цих моментів. Використовуючи другий порядок термодинамічної теорії збурень Баркера-Хендерсона (ТТЗ-БХ2) досліджено фазову поведінку колоїдної системи в об'ємі, що представлена полідисперсною сумішшю твердих сфер із взаємодією типу Морзе при високих ступенях полідисперсності з полідисперстю по енергії взаємодії, а також по розмірах частинок і енергії взаємодії одночасно. В топології двофазних діаграм, при високому ступені полідисперсності спостерігаються нові властивості: на додаток до звичайної критичної точки газ-рідина, з'являється друга критична точка, яка зумовлена полідисперсністю, відповідно криві хмари та тіні перетинаються двічі, і кожна з них утворює замкнену петлю, причому рідинна і газова гілки кривої хмари майже збігаються. При певному граничному значенні індексу полідисперсності криві хмари та тіні скорочуються і зникають. Також використовуючи високотемпературне наближення (ВТН) та середньосферичне наближення (ССН) аналогічну фазову поведінку отримано для іншої колоїдної системи, що представлена полідисперсною сумішшю твердих сфер з взаємодією Юкави з полідисперсністю по енергії взаємодії. Також для останньої моделі вище цього граничного значення індексу полідисперсності і при нижчих температурах отримано трифазне співіснування. В загальному спостерігається добре узгодження між двома теоретичними наближеннями, ВТН та ССН. Наші результати підтверджують якісні передбачення для двофазного та трифазного співіснування, які були отримані раніше в рамках наближення ван дер Ваальса. Далі, використовуючи поєднання ВТН та теорії масштабної частинки (ТМЧ) досліджено фазову поведінку останньої моделі, але в невпорядкованому пористому середовищі, яке представлене матрицею випадково розміщених твердосферних частинок. Запропоновано оригінальний метод аналітичного розрахунку радіальної функції розподілу твердосферної рідини в твердосферній матриці. Отримано подібну дво- та трифазну поведінку як і в об'ємному випадку, проте тоді ці фазові переходи були зумовлені зростанням полідисперсності, а тепер ще і завдяки характеристикам пористого середовища (зокрема густини матриці та відношення розмірів частинок матриці до розмірів частинок рідини). Тобто за рахунок матриці істотно збільшується ефект полідисперсності. Вперше показано, що пористе середовище при середніх полідисперсностях конкурує, а при великих — підсилює ефект полідисперсності. І наостанок, використовуючи поєднання ТТЗ Вертхейма та ТМЧ досліджено фазову поведінку полімерної системи, що представлена полідисперсною по довжині ланцюга сумішшю ланцюгових молекул з додатковою взаємодією квадратної ями, в невпорядкованому пористому середовищі. Показано, що для такої полімерної системи фазова поведінка системи визначається конкуренцією між полідисперсністю та властивостями пористого середовища. У той час як полідисперсність зумовлює розширення області фазового співіснування за рахунок підвищення критичної температури, пористе середовище зменшує значення як критичної температури, так і критичної густини, роблячи область фазового співіснування вужчою. Зі збільшенням відношення розмірів частинок рідини до розмірів частинок матриці цей ефект посилюється. Також збільшення середньої довжини ланцюга при фіксованих значеннях полідисперсності та густини матриці зміщує критичну точку до вищого значення температури та трохи меншої густини. Досліджено ефекти фракціонування частинок полідисперсних колоїдних та полімерних систем як в об'ємі, так і у пористому середовищі. Показано, що ступінь фракціонування залежить від температури. У всіх випадках частинки з більшими значеннями атрибуту полідисперсності (розміру, енергії взаємодії чи довжини ланцюга) фракціонують в високогустинну (рідку) фазу, а частинки з меншими значеннями — фракціонують в низькогустинну (газову) фазу.

2. The thesis is devoted to the study of the phase behavior and fractionation effects of colloidal and polymer systems in bulk and random porous media. The major challenge for a theoretical description of the phase behavior of polydisperse mixtures is due to the functional dependence of Helmholtz free energy of the system on the distribution function of species. As a result, phase equilibrium conditions are formulated in terms of the set of an infinite number of equations, e.g. chemical potential for each value of the continuous species index should be the same in each of the coexisting phases. Solution of such a set of equations for Helmholtz free energy of arbitrary form is next to impossible. We have extended and applied the scheme developed to calculate the phase diagrams of polydisperse mixtures described by the truncatable free energy (TFE) models, i.e., the models with Helmholtz

free energy defined by the finite number of the moments of the species distribution function. The latter feature of the TFE models enables one to formulate the phase equilibrium conditions in terms of a finite set of equations for these moments. To calculate the phase behavior of colloidal system, which is represented by polydisperse hard sphere Morse mixture, we propose an extension of the second-order Barker-Henderson perturbation theory. The theory is used to describe the liquid–gas phase behavior of the mixture with different type and different degree of polydispersity. In addition to the regular liquid–gas critical point, we observe the appearance of the second critical point induced by polydispersity. At high degree of polydispersity, several new features in the topology of the two-phase diagram have been observed: the cloud and shadow curves intersect twice and each of them forms a closed loop of the ellipsoidal-like shape with the liquid and gas branches of the cloud curve almost coinciding. With polydispersity increase, the two critical points merge and finally disappear. Approaching a certain limiting value of the polydispersity index, the cloud and shadow curves shrink and disappear. Beyond this limiting value, polydispersity induces the appearance of the three-phase equilibrium at lower temperatures. The same phase behavior we obtain for other colloidal system, which is represented by polydisperse hard sphere Yukawa mixture in the framework of high temperature approximation (HTA) and mean spherical approximation (MSA). In general, good agreement was observed between predictions of the two different theoretical methods, i.e., HTA and MSA. Our results confirm qualitative predictions for two- and three-phase coexistence obtained earlier within the framework of the van der Waals approach. Also we have studied the phase behavior of polydisperse Yukawa hard-sphere fluid confined in random porous media. The study is carried out using extension and combination of the HTA and scaled particle theory (SPT). We propose an analytical expression for the radial distribution function of the hard-sphere fluid in the hard sphere random matrix. Due to the confinement, polydispersity effects are substantially enhanced. At an intermediate degree of fluid polydispersity and low density of the matrix, we observe two-phase coexistence with two critical points, and cloud and shadow curves forming closed loops of ellipsoidal shape. With the increase of the matrix density and the constant degree of polydispersity, these two critical points merge and disappear, and at lower temperatures the system fractionates into three coexisting phases. A similar phase behavior was observed in the absence of the porous media caused, however, by the increase of the polydispersity. To study the liquid-gas phase behavior of polymer system, which is represented by polydisperse hard-sphere square-well chain fluid confined in the random porous media, we propose and apply an extension of Wertheim's thermodynamic perturbation theory and its combination with SPT. Thermodynamic properties of the reference system, represented by the hard sphere square-well fluid in the matrix, are calculated using corresponding extension of the second-order Barker-Henderson perturbation theory. We study effects of polydispersity and confinement on the phase behavior of the system. While polydispersity causes increase of the region of phase coexistence due to the critical temperature increase, confinement decreases the values of both critical temperature and critical density making the region of phase coexistence smaller. This effect is enhanced with the increase of the size ratio of the fluid and matrix particles. Fractionation effects of colloidal and polymer systems in bulk and random porous media also have been studied. The degree of fractionation depends on temperature. In all cases, particles with larger values of the polydispersity attribute are fractionated into a high-density (liquid) phase, and particles with lower values are fractionated into a low-density (gas) phase.

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. Калюжний Юрій Володимирович

2. Kalyuzhnyi Yurij V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.24

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. Пергаменщик Віктор Михайлович

2. Pergamenshchik Victor M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.15

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. Лебовка Микола Іванович

2. Lebovka Nikolai 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

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.