Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U004871

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-12-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мороз Костянтин Олександрович
2. Moroz Kostyantyn Oleksandrovych

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: 28-11-2006

Спеціальність за освітою: 7.070101

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 на термодинамічні властивості поліциклічних вуглеводнів

2. The influence of pressure on thermodynamic properties of polycyclic hydrocarbons

Реферат:

1. Дисертація присвячена дослідженням рівняння стану та молекулярної структури рідин. Отримані PVT дані, проведений розрахунок термодинамічних властивостей в інтервалі тисків від 0.1 до 245.2 МПа та температур від 313 К до 453 К для поліциклічних вуглеводнів та рідких систем із вмістом фулерену С60 і запропоновано обгрунтовані аналітичні залежності для знайдених термодинамічних властивостей. Встановлено, що температурні залежності коефіцєнта теплового розширення та модуля пружності на ізохорах мають ентропійний характер в усіх досліджених поліциклічних вуглеводнях. Здійснено пошук напівемпіричного рівняння стану, що допускає статистичне обгрунтування і має не лише перші, але і другі похідні такі, що адекватно передають термобаричні залежності термодинамічних властивостей молекулярних рідин: коефіцента теплового розширення, модуля пружності, ізотермічних приростів ентальпії, ентропії, та повної внутрішньої енергії, ізобаричної молярної теплоємності та ізохоричної молярної теплоємності. Методом

функцій густини ймовірності атом-атомного розподілу проведено розрахунок молекулярної структури поліциклічних вуглеводнів: пінана, ?-пінена, 1-3-диметиладамантана, 3-цик¬лопен¬тилтолуолу та 3-циклогексилтолуолу, а також розчину фулерену С60 в толуолі. Методом МД моделювання показано, що тиск посилює орієнтаційне упорядкування в молекулярних рідинах з анізотропною формою молекул, а додавання до них домішок із сферичною формою молекул послаблює орієнтаційне упорядкування в усьому дослідженому інтервалі тисків і температур.

2. It is investigated the equation of state and molecular structure of molecular liquids. It is obtained the PVT data and the calculation of thermodynamic properties is performed for polycyclic hydrocarbons and for liquid systems containing fullerene C60 in the range of pressures from 0.1 to 245.2 MPa and in the range of temperatures from 313 K to 453 K. Substantiated analytic relations are suggested for the obtained thermodynamic properties. It is established that thermal expansivity and elastic modulus as a function of temperature on isochors reveal entropic character in all the investigated polycyclic hydrocarbons. It is carried out the search of semiempiric equation of state admitting statistic substantiation. The equation found has not only first but also second derivatives adequately representing the following thermobaric properties of molecular liquids: isobaric expansivity, elastic modulus, isothermal deviation of enthalpy, entropy, total internal energy, isobaric molar capacity, isochoric molarcapacity. It is carried out the calculation of molecular structure by using the method of probability density atom-atom distribution for polycyclic hydrocarbons: pinane, ?-pinene, 1-3-dimethyladamantane, 3-cyclopenthyltoluene, 3-cyclohexyltoluene, and fullerene C60 solution in toluene. It is shown by using the method of MD modelling that pressure amplifies orientational ordering in molecular liquids with anisotropic form of molecules, and the admixtures with spherical form of molecules weaken orientational ordering in the whole investigated range of pressures and temperatures.

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. Головко Мирослав Федорович

2. Головко Мирослав Федорович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 02.04.02

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 Євгенович

2. Погорелов Валерій Євгенович

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.