

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U101301

Державний реєстраційний номер: 0118U003011

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-02-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Статистична теорія складних плинів: рівноважні та динамічні властивості

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики
конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свенціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322761978, 380322761158

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4462.8

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Статистична теорія складних плинів: рівноважні та динамічні властивості

Назва роботи англійською:

Statistical theory of complex flows: equilibrium and dynamic properties

Реферат українською:

Розвинуто і поєднано основні методи комп'ютерного моделювання та статистичної теорії для дослідження структурних, динамічних та термодинамічних властивостей складних біохімічних рідин. Проведено моделювання водних розчинів уранілу із функціоналізованими вуглецевими нанотрубками в якості прекоцентраційних агентів з метою подальшої фільтрації. Для опису процесів переносу іонів у системі іонний розчин -- пористе середовище застосовано кінетичний підхід, що базується на ланцюжку рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій розподілу частинок. Використовуючи метод колективних змінних, сформульовано новий теоретичний підхід до опису фазової рівноваги газ-рідина моделі іонної рідини у неупорядкованій твердокульковій матриці. Для узгодженого опису кінетики та гідродинаміки систем взаємодіючих частинок об'єднано метод колективних змінних та метод нерівноважного статистичного оператора.

Реферат англійською:

The methods of computer simulations and statistical theory have been developed and combined to study the structure, dynamics and thermodynamic properties of complex biochemical liquids. The aqueous solutions of uranyl with functionalized carbon nanotubes were simulated as preconcentration agents for further filtration. A kinetic approach based on the BBGKI chain of equations for the nonequilibrium particle distribution functions was applied to describe the processes of ion transfer in a system composed of ionic solution in a porous medium. Using the method of collective variables, a new theoretical approach to describe the gas-liquid phase equilibrium of a model ionic fluid in a disordered hard-sphere matrix is formulated. The method of collective variables and the method of nonequilibrium statistical operator were combined for a consistent description of the kinetics and hydrodynamics of the systems of interacting particles.

Індекс УДК: 53, 532; 533; 536; 537; 537.75; 538.9

Коди тематичних рубрик: 29.01.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Токарчук Михайло Васильович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Теоретичні методи: метод колективних змінних, інтегральних рівнянь, метод нерівноважного статистичного оператора, функціональний метод теорії поля у поєднанні із комп'ютерними методами молекулярної динаміки та Монте-Карло досліджень термодинамічних, структурних та динамічних властивостей складних плинів

Назва НТП англійською: Theoretical methods: the method of collective variables, the method of integral equations, the method of nonequilibrium statistical operator, the method of field theory, the Monte Carlo and molecular dynamics methods of computer simulations

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У результаті поєднання методу оптимальних статистичних ансамблів, мультикрокового декомпозиційного інтегрування, екстраполяцій сольватаційних сил, температурних реплік отримано новий підхід, який дає можливість суттєво прискорити проведення комп'ютерного експерименту за високої точності обчислень. Запропонований підхід застосовано до ряду моделей біохімічних рідин різної складності, включаючи білки у воді та продемонстровано його високу продуктивність у порівнянні з попередніми методами. Узагальнення термодинамічної теорії збурень для асоційованих рідин другого порядку та самоузгодженої фононної теорії кристалізації для опису колоїдних систем з неоднорідно функціоналізованою поверхнею застосовано до вивчення термодинамічних властивостей та фазової поведінки колоїдних систем, що складаються з двовимірних частинок Януса з одним патчем.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія енергоресурсів, фундаментальні дослідження в галузі природничих наук

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: дослідники в галузі природничих наук

Перспективні ринки: світова наукова спільнота

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

ІХ. Бібліографічний опис

. Kastelic M., Dill K.A., Kalyuzhnyi Y.V., Vlachy V. Controlling the viscosities of antibody solutions through control of their binding sites. *J.Mol.Liq.* 2018, 270, 234-242.

Kalyuzhnyi Y.V., Vlachy V. Modeling the depletion effect caused by an addition of polymer to monoclonal antibody solutions. *J.Phys.:Cond.Matt.* 2018, 30, 485101.

Kalyuzhnyi Y.V., Skvara J., Nezbeda I. Analytic results for the three- and fourparticle correlation functions of the fluid of hard disks. *J.Chem.Phys.* 2019, 150, 034502.

M. Druchok, M. Luksic, "Carboxylated carbon nanotubes corked with tetraalkylammonium cations: A concept of nanocarriers in aqueous solutions". *J. Mol. Liq.*, 270 (2018) 203-211.

P. Hlushak, M. Tokarchuk, Markiv B. "Longitudinal optic excitations in ionic melts within an ion-polarization model: a theoretical study *J. Mol. Liq.*, 260 (2018) 9-17.

P. Kostrobij, I. Grygorchak, I. Ivashchyshyn, B. Markovych, O. Viznovych, M. Tokarchuk "Generalized electrodiffusion equation with fractality of space-time: experiment and theory". *J. Phys. Chem. A*, 122 (2018) 4099-4110.

Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Zelinska I., Tokarchuk M. Generalized Cattaneo–Maxwell diffusion equation with fractional derivatives. *Dispersion relations. Mathematical Modeling and Computing.* – 2019. – Vol. 6, NO 1. – P. 58–68.

Kostrobij P., Markovych B., Viznovych O., Tokarchuk M. Generalized transport equation with nonlocality of space–time. *Zubarev's NSO method // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* – 2019. – Vol. 514. – P. 63–70.

M. Holovko, V. Schmotolokha, "Scaled particle theory for a hard spherocylinder 242 fluid in a disordered porous medium: Carnahan–Starling and Parsons–Lee corrections *Condens. Matter Phys.*, 21 (2018) 13602.

M. Holovko, I. Protsykevich, "On the application of the associative mean spherica approximation to the ion-dipole model for electrolyte solutions". *J. Mol. Liq.*, 270 (2018) 46-51.

A.V. Bandura, M.F. Holovko, S.N. Lvov. "The chemical potential of a dipole in dipolar solvent at infinite dilution: Mean spherical approximation and Monte Carlo simulation". *J. Mol. Liq.*, 270 (2018) 52-61.

O. Patsahan, T. Patsahan, M. Holovko. "Vapour-liquids critical parameters of a 2:1 primitive model of ionic fluids confined in disordered porous media". *J. Mol. Liq.*, 270 (2018), 97-105.

G. Bokun, D. di Caprio, M. Holovko, V. Vikhrenko. "The system of mobile ions in lattice models: Screening effects, thermodynamic and electrophysical properties". *J. Mol. Liq.*, 270 (2018) 183-190.

O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, M.F. Holovko. "Vapour-liquid phase behaviour of a size-asymmetric model of ionic fluids confined in a disordered matrix: The collectivevariables-based approach". *Phys. Rev E*, 97 (2018) 022109.

M. Hvozď, T. Patsahan, M. Holovko. "Isotropic-nematic transition and demixing behaviour in binary mixtures of hard spheres and hard spherocylinders confined in disordered porous medium: Scaled particle theory *J. Phys. Chem B*, 122 (2018) 5534-5546.

S. Hlushak, "Heat of adsorption, adsorption stress, and optimal storage of methane in slit and cylindrical carbon pores predicted by classical density functional theory *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20 (2018) 872-888.

G. Bokun, M.F. Holovko. "Cluster expansion for the description of condensed state: crystalline cell approach". *Cond. Matter Phys.*, 21 (2018) 43501.

I. Omelyan, A. Kovalenko, Enhanced solvation force extrapolation for speeding up molecular dynamics simulations of complex biochemical liquids, J. Chem. Phys. 151 (2019) 214102.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мриглод Ігор Миронович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Гвоздь Марта Валентинівна
(01.04.24)

Гвоздь Тарас Валентинович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Глушак Петро Андрійович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Дмитрієва Олена Сергіївна

Дручок Максим Юрійович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Калюжний Юрій Володимирович
(д. ф.-м. н., 01.04.24)

Кравців Іван Ярославович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Мельник Роман Степанович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Омелян Ігор Петрович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Пацаган Тарас Миколайович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Процикевич Ігор Андрійович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Степаненко Олександр Олександрович

Трохимчук Андрій Дмитрович
(д. ф.-м. н., 01.04.24)

Шмотолоха Володимир Ігорович
(01.04.24)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Мельник Роман Степанович

Телефон

+38 (032) 276-11-57

Реєстратор

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

