

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U007734

Державний реєстраційний номер: 0106U003722

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-09-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Еволюція структури та складу фаз в багатофазних системах з рухомими границями фаз. Молекулярна спектроскопія. Теорія спектрів молекул. Релятивістська космологія

Початок етапу: 01.2006

Закінчення етапу: 12.2010

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0562)47-33-97, (0562)47-33-16

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, 8, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380567462706, 380567462668

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрямок фінансування:

Джерела фінансування

7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Еволюція структури та складу фаз в багатофазних системах з рухомими границями фаз. Молекулярна спектроскопія. Теорія спектрів молекул. Релятивістська космологія

Назва роботи англійською:

Structure and phase composition evolution in multiphase systems with moving phase boundaries. Molecular spectroscopy. Theory of molecular spectra. Relativistic cosmology

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – нежорсткі молекули з інверсійним та торсіонним рухом; крекінг вуглеводнів в умовах кавітації; розчинність окислів металів в діоксиді цирконію; багатошарові (складові) тіла і тіла простої геометричної форми при екстремальних впливах; остаточні продукти розробки радіоактивних руд. Мета роботи – розробка методів розрахунку коливально-обертальних станів нежорстких молекул з інверсійним та торсіонним рухом, розвиток квазікласичних методів розрахунку високо збуджених станів молекул; доказ можливості використання кавітації для крекінгу вуглеводів нафти; встановити залежність розчинності оксидів металів від їх характеристик; розробка наближених аналітичних розв'язків задач нестационарної теплопровідності для багатошарових тіл при екстремальних теплових впливах; розробка методів нейтралізації забруднень підземних вод. Метод дослідження – математичні методи теоретичної фізики; наближенні аналітичні методи операційного аналізу, метод степеневих рядів, а також числові методи; математичне моделювання. Отримано новий точний квантово-механічний гамільтоніан для нежорстких молекул, які виконують інверсійний та торсіонний рух. Розроблено квазікласичний метод розрахунку високо збуджених коливально-обертальних станів молекул. Результати можуть використовуватись для практично важливої задачі розшифровки спектрів молекул. Показана можливість крекінга вуглеводів нафти шляхом гідродинамічної кавітації. Детальний аналіз цієї можливості дозволив зробити оптимістичний прогноз про можливість збільшити глибину переробки вуглеводів нафти на 20-30%. Знайдено полуемпіричний вираз для ієрархії розчинностей оксидів металів в діоксиді цирконію, що важливо при отриманні твердих високотемпературних електролітів. Розроблена математична модель розрахунку температурних полів багатошарової конструкції при екстремальних теплових впливах. Розв'язана задача нестационарної теплопровідності при екстремальних впливах. Розроблені схеми активної дії – фізико-хімічна нейтралізація ділянок з підвищеним змістом сульфатів, що пристосовані до місцевих умов, а також постійний моніторинг підземних вод для контролю за розповсюдженням радіонуклідів від хвостосховищ продуктів переробки уранових руд, що важливо для екологічної безпеки регіону. Галузі застосування – К 73.10.0, DF 23.20.0, DJ 28.11.0, О 90.01.

Реферат англійською:

Object of research – nonrigid molecules with inversion and torsion motion; cracking hydrocarbons in cavitation conditions; solubility of oxides of metals in zirconium dioxide; multilayered (compound) bodies and bodies of the simple geometrical form at extreme exposures; residual products of exploitation of autunites. The work purpose – working out of methods of calculation of vibration-rotation states of nonrigid molecules with inversion and torsion motion, development semiclassical methods of calculating high-excited states of molecules; the proof of possibility of use cavitation for cracking oil hydrocarbons; to establish dependence of solubility oxides of metals from their characteristics; working out of the approximate analytical solutions of problems of non-stationary heat conductivity for multilayered bodies at extreme thermal influences; working out of methods of neutralization of pollution of underground waters. A research method – mathematical methods of theoretical physics; the approximate analytical methods of operation calculation, method of power series, and also numerical methods; mathematical modeling. The new exact quantum-mechanical Hamiltonian has been derived for the nonrigid

molecules making inversion and torsion motion. The semiclassical method of calculating high-excited vibration-rotation energy levels of molecules was developed. These results can be used for practically important problem of decoding molecular spectra. Possibility of cracking hydrocarbons of oil by hydrodynamic cavitation was shown. The detailed analysis of this possibility has allowed to make the optimistic forecast about possibility to increase depth of processing hydrocarbons of oil on 20–30%. Semiempirical expression for hierarchy of solubilities of oxides of metals in zirconium dioxide is received, that is important for reception of solid high-temperature electrolyte. The mathematical model of calculating temperature fields of a multilayered construction was developed at extreme thermal influences. The problem of non-stationary heat conductivity was solved at extreme exposures. With reference to local conditions schemes of active influence are developed – physical and chemical neutralisation of areas with the raised maintenance of sulphates, and also constant monitoring of underground waters for the control over distribution radionuclides from radioactive waste storage of products of processing uranium ores, that is important for ecological safety of region. Application fields – K 73.10.0, DF 23.20.0, DJ 28.11.0, O 90.01.

Індекс УДК: 544, 539.19+519.6+620.197.5+530.12

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Нестеренко Олександр Іванович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Новий точний квантово-механічний гамільтоніан для 5-6 атомних нежорстких молекул, які виконують інверсійний та торсіонний рух, для розшифровки спектрів молекул.

Назва НТП англійською: A new exact quantum-mechanical Hamiltonian for 5-6 nuclear nonrigid molecules making inversion and torsion motion for decoding molecular spectra.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Отримано новий точний квантово-механічний гамільтоніан для 5-6 -атомних нежорстких молекул, які виконують інверсійний та торсіонний рух.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 1 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науковці в галузі теоретичної фізики

Перспективні ринки: СНД, країни дального зарубіжжя

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): немає

Додаткова інформація: не надаються

Назва НТП українською: Математична модель розрахунку температурних полів багатошарових конструкцій при екстремальних теплових впливах.

Назва НТП англійською: Mathematical model of calculating temperature fields of a multilayered construction at extreme thermal influences.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблена математична модель розрахунку температурних полів багат шарової конструкції при екстремальних теплових впливах.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 1 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства металургійної та машинобудівної промисловостей

Перспективні ринки: Україна, країни СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): немає

Додаткова інформація: не надаються

Назва НТП українською: Схеми активної дії – фізико-хімічної нейтралізації ділянок з підвищеною концентрацією сульфатів, а також постійного моніторингу підземних вод для контролю над розповсюдженням радіонуклідів від хвістосховищ продуктів переробки уранових руд для екологічної безпеки.

Назва НТП англійською: Schemes of active influence – physical and chemical neutralization of sites with the raised maintenance of sulphates, and also constant monitoring of underground waters for the control over distribution radionuclides from radioactive waste storage of products of processing uranium ores for ecological safety.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені схеми фізико-хімічної нейтралізації ділянок з підвищеним змістом сульфатів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 1 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства гірничорудної промисловості, міністерство екології України

Перспективні ринки: Україна, країни СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): немає

Додаткова інформація: не надаються

Назва НТП українською: Полуемпіричний вираз для ієрархії розчинностей оксидів металів в диоксиді цирконію для отримання твердих високотемпературних електролітів.

Назва НТП англійською: Semiempirical expression for hierarchy of solubility oxide metals in dioxide zirconium to get solid high-temperature electrolytes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Знайдено полуемпіричний вираз для ієрархії розчинностей оксидів металів в диоксиді цирконію.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 1 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства хімічної галузі

Перспективні ринки: Україна, країни СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): немає

Додаткова інформація: не надаються

Назва НТП українською: Крекінг вуглеводів нафти шляхом гідродинамічної кавітації.

Назва НТП англійською: Cracking hydrocarbons of oil by hydrodynamic cavitation.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Показана можливість крекінга вуглеводів нафти шляхом гідродинамічної кавітації.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 1 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства нафтохімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): немає

Додаткова інформація: не надаються

IX. Бібліографічний опис

1. Makarewicz, J. The rovibrational molecular Hamiltonian in mixed bond-angle and umbrella-like coordinates. [Text]/J. Makarewicz, A.Skalozub// J. Phys. Chem. A. - 2007.- Vol. 111- P.7860-7869; 2. Skalozub, A. Quantum and nonadiabatic corrections in semiclassical quantization formulas for describing vibration-rotation spectra of

nonrigid molecules. [Text]/A.Skalozub // The 20th Colloquium of High Resolution Molecular Spectroscopy. France, Dijon, September 2007. – P. 304; 3. Нестеренко, А.И. Возможность крекинга углеводов под действием кавитации. Количественная энергетическая оценка. [Текст]/ А.И. Нестеренко, Ю.С. Берлизов// ХТТМ. – 2007. – №6. – С. 43–45; 4. Нестеренко, А.И. Об использовании явления кавитации для крекинга углеводов. [Текст]/ А.И. Нестеренко, Ю.С. Берлизов// ХТТМ. – 2008. – №4. – С. 41–43; 5. Нестеренко, А.И. Расчет средневзвешенного числа циклов кавитационной интенсификации крекинга нефтяного сырья. [Текст]/ А.И. Нестеренко, Ю.С. Берлизов, Ю.Ю. Берлизова// ХТТМ. – 2009. – №2. – С. 47–50; 6. Верещак, В.Г. Процессы стабилизации высокотемпературных кристаллических модификаций диоксида циркония. Сообщение 1. Растворимость оксидов металлов в диоксиде циркония. Влияние энтропийного фактора. [Текст]/ В.Г. Верещак, Н. Г. Нестеренко // Вопросы химии и химической технологии. – 2009. – №3. – С.163–168; 7. Верещак, В.Г. Процессы стабилизации высокотемпературных кристаллических модификаций диоксида циркония. Сообщение 2. Растворимость оксидов металлов в диоксиде циркония. Влияние упругих напряжений. [Текст]/ В.Г. Верещак, Н. Г. Нестеренко // Вопросы химии и химической технологии. – 2009. – №4. – С.174–177; 8. Селезнева, Н.В. Математическое моделирование температурных полей многослойных тел при экстремальных тепловых воздействиях. [Текст] / Н.В. Селезнева// Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Вип. 2 (47). – Дніпропетровськ, 2010. – С.67–73; 9. Веселовский, В.Б. Математическое моделирование образования и разрушения гололедо-изморозевых отложений на элементах конструкций. [Текст]/ В.Б. Веселовский, Н.В. Селезнева, К.В. Горелова// Вестник Херсонского национального технического университета. Вып. 2 (25). – Херсон: ХНТУ, 2006. – С.106–110; 10. Садовенко, И.А. Управление параметрами физико-химической нейтрализации остаточных растворов подземного выщелачивания. [Текст]/ И.А. Садовенко, Д.В. Рудаков, З.Н. Якубовская // Науковий вісник НГУ. – 2008. – № 8. – С. 14–18; 11. Садовенко, І.О. Моделювання поширення тріщини гідророзриву з урахуванням утворення області ослаблених зв'язків. [Текст]/ І.О. Садовенко, Я.Б. Петровський, Ю.І. Демченко, З.М. Якубовська // Науковий вісник НГУ. – 2009. – № 6. – С.34–38.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Гірін Олег Борисович

Перелік осіб-виконавців

Бурліков Вячеслав Валерьевич

Карпова Людмила Михалівна

Кравченко Віра Сергіївна

Малієнко Валентина Дмитрівна

Нестеренко Микола Григорович

Селезньова Надія Вікторівна

Скалозуб Олександр Сергійович

Сорочинська Вікторія Євгенівна

Татарко Лариса Гаврилівна

Тиха Людмила Станіславівна

Якубовська Зінаїда Миколаївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

