

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U004085

Державний реєстраційний номер: 0123U102729

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-08-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розроблення теоретичних методів та методів комп'ютерного моделювання для опису термодинамічних властивостей іонної рідини у невідпорядкованому пористому середовищі з молекулярними іонами, представленими гомо- та гетеро- ядерними зарядженими димерами. Застосування теорії масштабної частинки для опису структурних та термодинамічних властивостей базисної системи для іонних рідин з молекулярними іонами різної геометрії та будови.

Початок етапу: 05.2023

Закінчення етапу: 08.2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свенціцького, буд. 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): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201380

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 520.900
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фазова поведінка іонних рідин у неупорядкованому просторовому обмеженні

Назва роботи англійською:

Phase behaviour of ionic liquids in a disordered confinement

Реферат українською:

Іонні рідини та іонні розчини складних молекулярних іонів, завдяки своїм унікальним фізико-хімічним властивостям, відіграють важливу роль у фундаментальних дослідженнях і сучасних технологіях. Значна частина технологічних застосувань базуються на властивостях іонних рідин у пористих матеріалах. Метою даної наукової роботи є розробка теорії фазових переходів іонних рідин із складною будовою молекул в умовах неупорядкованого просторового обмеження, що сформоване матрицею нерухомих частинок пористого матеріалу. Для її реалізації, впродовж цього етапу, розроблено теоретичний підхід для опису термодинамічних властивостей іонної рідини у неупорядкованому пористому середовищі з молекулярними іонами, представленими гомо- та гетеро- ядерними зарядженими димерами, який дозволяє здійснити коректне врахування внеску від електростатичної взаємодії. Отримано аналітичні вирази для хімічних потенціалів і тиску, які містять внесок від системи відліку (СВ), представленій як суміш твердих сфер різного розміру, що знаходяться у матриці неупорядкованих твердих сфер та внесок від іонної підсистеми, представленій аніонами сферичної форми і несферичними катіонами. Важливо, що внесок від іонної підсистеми у термодинаміку повної системи залежить від парних функцій розподілу на контакті між частинками рідини у СВ. Запропонована на даному етапі теорія може бути модифікована на випадок іонів складнішої форми. Зокрема, нами розглянуто модель іонної рідини, де іони моделюються зарядженими сфероциліндрами, і запропоновано підхід, в рамках якого СВ представляє собою тверді сфероциліндри у неупорядкованій матриці твердих сфер. Ми застосували теорію масштабної частинки (ТМЧ), яка дозволяє опис частинок довільної опуклої форми в матриці. Точність такого підходу перевірено шляхом порівняння залежностей хімічного потенціалу від густини, отриманих з ТМЧ, з результатами комп'ютерного моделювання.

Реферат англійською:

Ionic liquids and ionic solutions of complex molecular ions, due to their unique physicochemical properties, play an important role in fundamental research and modern technologies. A significant part of technological applications are based on the properties of ionic liquids in porous materials. The aim of this research work is to develop a theory of phase transitions in ionic liquids with complex molecular structures under conditions of disordered spatial confinement formed by a matrix of immobile particles of porous material. For its realization, at this stage, a theoretical approach is developed to describe the thermodynamic properties of ionic liquids in a disordered porous confinement with molecular ions presented as homo- and hetero-nuclear charged dimers allowing for a correct account of the contribution from electrostatic interactions. Analytical expressions for chemical potentials and pressure are obtained, incorporating the contribution from the reference system (RS), represented as a mixture of hard spheres of different sizes in a matrix of disordered hard spheres, and the contribution from the ionic subsystem, represented by spherical anions and non-spherical cations. Importantly, the contribution from the ionic subsystem to the thermodynamics of the full system depends on the pair distribution functions at the contact between fluid particles within the RS. The theory developed at this stage can be modified for the case of more complex ions. In particular, a model of an ionic liquid, where ions are modelled as charged spherocylinders, is considered. We proposed an approach where the RS is represented as hard spherocylinders in a disordered matrix of hard spheres. We use the scale particle theory, which allows one to describe the particles of arbitrary convex shape in a matrix. The accuracy of this approach is verified by comparing

the dependences of the chemical potential on the density obtained from the SPT with the results from computer simulations.

Індекс УДК: 532; 533; 536; 538.9

Коди тематичних рубрик: 29.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Пацаган Оксана Вадимівна

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: старший науковий співробітник

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Розроблено теоретичний підхід до опису термодинамічних властивостей іонної рідини у неупорядкованому пористому середовищі з молекулярними іонами, представленими гомо- та гетеро-ядерними димерами. Метод комп'ютерного моделювання Монте Карло застосовано до розрахунку хімічних потенціалів базисної системи для іонних рідин з молекулярними іонами різної геометрії та будови.

Назва НТП англійською: A theoretical approach is developed to describe the thermodynamic properties of ionic liquids in a disordered porous confinement with molecular ions presented as homo- and hetero-nuclear charged dimers. Using the Monte Carlo simulations, the chemical potentials of the reference system for the ionic liquids with molecular ions of different geometry and shape are calculated.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Отримано аналітичні вирази для хімічних потенціалів і тиску моделі іонної рідини у неупорядкованому пористому обмеженні, які містять внесок від системи відліку, представленої як суміш твердих сфер різного розміру, що знаходяться у матриці неупорядкованих твердих сфер та внесок від іонної підсистеми, представленої аніонами сферичної форми і несферичними катіонами. Отримано аналітичні вирази для контактних значень парних функцій розподілу базисної системи. За допомогою комп'ютерного моделювання методом Монте-Карло виконано розрахунок хімічного потенціалу в залежності від густини для систем димерів та сфероциліндрів. Встановлено наближення, в рамках якого модель твердих димерів можна співвіднести із моделлю твердих сфероциліндрів. Для системи димерів і сфероциліндрів в матрицях із різною пористістю отримано добре узгодження між результатами теорії масштабної частинки та комп'ютерним моделюванням.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фундаментальні дослідження в галузі природничих наук

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Брик Тарас Михайлович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

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

Головко Мирослав Федорович
(д. ф.-м. н.)

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

Кукаркін Назар Борисович

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

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бзовська І.С.

Телефон

+38 (032) 276-77-86

Реєстратор

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

