Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U001378

Державний реєстраційний номер: 0111U010518

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-02-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Мікроскопічні засади цілеспрямованого прогнозування функціональних властивостей молекулярних, іонних та іон-молекулярних рідин в об'ємній фазі та в вуглецевих наноматеріалах

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 705 12 54, (057)7177-161

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 278.4

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Мікроскопічні засади цілеспрямованого прогнозування функціональних властивостей молекулярних, іонних та іон-молекулярних рідин в об'ємній фазі та в вуглецевих наноматеріалах

Назва роботи англійською:

Microscopic basis of the purposeful prediction of epy functional properties of the molecular, ionic and ion-molecular liquids in the bulk phase and in Carbon Nanomaterials

Реферат українською:

Об'єкти дослідження: іонні рідини на основі солей імідазолію, а також іон-молекулярні системи - неводні електролітні розчини 1-1 та 2-1 електролітів в неводних розчинниках, а також подвійні суміші іонних рідин та неводних молекулярних розчинників. Мета роботи: Одержання надійної та детальної інформації з мікроскопічної структури, іонної та молекулярної динаміки піко- та нанорозмірного масштабу та потенціалів міжчастинкових взаємодій в рідких неводних іон-молекулярних системах. Метод дослідження: ab initio та класичне молекулярно-динамічне (МД) моделювання, кондуктометрія, УФ та КР спектроскопія. Проведено дослідження розчинів перхлоратів Ni, Mg, Ca, Sr та Ba в ацетонітрилі у присутності 3-гідроксифлавону методами кондуктометрії, УФ спектроскопії та МД моделювання. Було розроблено моделі іонних рівноваг і одержано константи асоціації та комплексоутворення та граничні молярні провідності усіх типів заряджених частинок. Для Ni2+, Ca2+ і Sr2+ процес комплексоутворення з 3-гідроксифлавоном в ацетонітрилі супроводжується утворенням частинок [Kt(AN)nflv]2+, а для Mg2+ і Ba2+, утворюється однозарядна комплексна частинка типу [KtClO4(AN)nflv]+.

Реферат англійською:

Objects of investigation: imidazolium ionic liquids, non-aqueous solutions of 1-1 and 2-1 electrolytes, binary mixtures of ionic and molecular liquids. The aim of this work is to obtain detailed and reliable information on the microscopic structure, ionic and molecular dynamics on pico- and nano- scales, and also on interparticle interactions in nonaqueous ion-molecular systems and ionic liquids. Methods of investigation: ab initio and classic molecular dynamics simulation, conductometry, UV and Raman spectroscopy. Solutions of Ni, Mg, Ca, Sr and Ba perchlorates in acetonitrile with 3 hydroxyphlavone were investigated by conductometry, UV spectroscopy and MD simulation. Models for ionic equilibrium processes were proposed and equilibrium constants with limiting ionic conductances obtained. In solutions Ni2+, Ca2+ and Sr2+ forme with flavonole particles of type [Kt(AN)nflv]2+, whereas Mg2+ and Ba2+ form ionic pairs of type [KtClO4(AN)nflv]+. Diluted solutions of BMIMBr, EMIMBF4, BMIMBF4, HexMIMBF4, BMIMTf and BMPBF4 in AN and MeOH were investigated by conductometry method at 5 - 55 oC.

Індекс УДК: 544.142.6, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.15.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: В'юник Іван Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Мікроскопічні структури, іонної та молекулярної динаміки піко- та нанорозмірного масштабу та потенціалів міжчастинкових взаємодій в рідких неводних іон-молекулярних системах.

Назва НТП англійською: Microscopic basis of the purposeful prediction of epy functional properties of the molecular, ionic and ion-molecular liquids in the bulk phase and in Carbon Nanomaterials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.20.0 Дослідження та розробки в галузі гуманітарних та суспільних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджено суміші іонних рідин (EMIMBF4 та BMIMBF4) з ацетонітрилом методами класичного та квантового МД моделювання. У чистих IP спостерігається сильний взаємний вплив іонів, що призводить до поляризації частинок та переносу заряду, в результаті чего заряди на іонах IP не дорівнюють 1, а становлять ±0.814 для EMIMBF4 і ±0.807 для BMIMBF4. Проведений кластерний аналіз показав, що концентрація суміші, при якій спостерігається максимум електричної провідності, співпадає з концентрацією IP, до якої кількість вільних іонів превищує кількість іонних пар. Методом КР-спектроскопії проведено дослідження міжмолекулярних та іон-молекулярних взаємодій у бінарній суміші [BmIm][PF6]-?-БЛ в усьому діапазоні складів. Для детальної інтерпретації експериментальних спектрів в області C=O та C-H колеиваннь виконано квантово-хімічені розрахунки індивідуальних молекул ?-БЛ та їх димерів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2014-1016 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Катрич Віктор Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Агєєнко В.

В'юник І.

Ворошилова Ю.

Калугін О.

Колеснік Я.

Корсун О.

Лукінова О.

Мареха Б.

Черножук Т.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності