Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0216U002935

Державний реєстраційний номер: 0116U007765

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-12-2016

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Спектроскопічні дослідження води в обмеженому об'ємі: від низькотемпературних матриць до нано-структурованих матеріалів, що використовуються в інноваційній медицині.

Початок етапу: 11.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 521-32-05

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7722 - кошти підприємств, установ, організацій України

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 130

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Спектроскопічні дослідження води в обмеженому об'ємі: від низькотемпературних матриць до нано-структурованих матеріалів, що використовуються в інноваційній медицині.

Назва роботи англійською:

Spectroscopic studies of water to a limited extent from low-temperature matrix for nano-structured materials used in innovative medicine.

Реферат українською:

Досліджено температурну залежність інтенсивності коливально-обертальної смуги поглинання, що відповідає деформаційним коливанням гідроксильної групи молекул води, ізольованих в аргоновій матриці. Знайдено набір обертальних констант, які задовільно описують частоти та інтенсивності експериментально спостережуваних спектральних смуг. Проаналізовано коливальну динаміку протона у протонованому димері води. Методами квантової хімії розраховано структуру та коливальні спектри (в гармонічному та ангармонічному наближеннях) протонованого димеру води у різних наближеннях.

Реферат англійською:

The temperature dependence of the intensity vibrational-rotational absorption bands corresponding to deformation vibrations of the hydroxyl group of water molecules, isolated in an argon matrix. Found a set of rotational constants that satisfactorily describe the frequency and intensity of experimentally observed spectral bands. Analyzed the vibrational dynamics of protons in the protonated water dimer. Quantum chemistry methods designed structure and vibrational spectra (in harmonic and inharmonic approximation) protonated water dimer in various approximations.

Індекс УДК: 532, 535.33.34; 532

Коди тематичних рубрик: 29.17.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Погорелов Валерій Євгенович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові експериментальні дані про структуру води.

Назва НТП англійською: New experimental data on the structure of water.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: нові експериментальні дані

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зареєстровані спектри інфрачервоного поглинання води, ізольованої в аргоновій матриці, при різних температурах від 9 К до 50 К. Виконано віднесення спектральних смуг, що спостерігаються в експерименті, до кластерів води, які складаються з різної кількості молекул. Показано, що температурна залежність зареєстрованих спектрів дає можливість побудувати модель структурних перетворень, які відбуваються у воді під час фазового перетворення з газоподібного стану в конденсований.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: наука

Перспективні ринки: Україна та інші країни

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 Мартинюк Віктор Семенович

Перелік осіб-виконавців

Безручко Інна Володимирівна

Білий Микола Михайлович

Васильєва Антоніна Олександрівна

Васківський Євгеній Вікторович

Дорошенко Ірина Юріївна

Дорошенко Олена Петрівна

Погорелов Валерій Євгенійович

Чернолевська Єлизавета Анатоліївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

