

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U001456

Державний реєстраційний номер: 0109U000410

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-02-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження мезоскопічної структури метастабільних кластерів чистих компонентів і сумішей в N,V,T-ансамблі за допомогою молекулярно-динамічного моделювання.

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеська державна академія холоду Міносвіти України

Код за ЄДРПОУ: 02071085

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 720-91-28

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 63.873

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження мезоскопічної (нано-) структури і механізму взаємної обмеженої розчинності надкритичних флюїдів в водних розчинах іонних рідин

Назва роботи англійською:

Investigation of mesoscopic (nano-) structure and mechanism of restricted co-solubility of supercritical fluids in aqueous with ionic liquids

Реферат українською:

Моделювання мезоскопічної структури іонних рідин ([bmim][BF₄], [bmim][PF₆]) здійснено в (N,V,T)-ансамблі 512 частинок з додатковим крупнозернистим розбиттям об'єму комірки на кубічні відкриті підсистеми, які його щільно заповнюють. Найбільш суттєвою деталлю процесу є простота парного потенціалу з параметрами, які ефективно залежать від температури.

Реферат англійською:

Computer modeling of mesoscopic structure in the ionic liquids ([bmim][BF₄], [bmim][PF₆]) has been performed by the (N,V,T)-ensemble for 512 particles by the additional graining of a simulated box into the set of closed-packing, cubic, open subsystems. The most essential feature of process is a simplicity of the pair potential with the effective T-dependent parameters.

Індекс УДК: 57:51-76;57.02.001.57, 621.57.041

Коди тематичних рубрик: 34.03.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Роганков Віталій Борисович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дослідження мезоскопічної (нано-) структури і механізму взаємної обмеженої розчинності надкритичних флюїдів в водних розчинах іонних рідин

Назва НТП англійською: Investigation of mesoscopic (nano-) structure and mechanism of restricted co-solubility of supercritical fluids in aqueous with ionic liquids

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В даному проекті розробляється концепція, яка змінює співвідношення мікро- і макроінформації про речовину і дозволяє прогнозувати її мезоструктуру. Послідовність побудови моделі, яка пропонується, стартує, на відміну від статистико-механічного розгляду, з використання експериментальних даних по фазовому переходу, в яких найбільш повно відбиваються індивідуальні особливості системи. Запропоновані точні формули розрахунку коефіцієнтів ФРС забезпечують досить надійний опис однофазних областей газу і рідини. Наступним етапом є однозначно-визначені співвідношення зв'язку вказаних коефіцієнтів з Т-залежними параметрами потенціалу (12/6), який пропонується використати для речовин будь-якого рівня молекулярної організації. Такий підхід, щонайменше, суттєво полегшує перехід до опису іонних рідин і їх фазової поведінки.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2012

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: МОНМС

Перспективні ринки: Україна

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

1.V.B.Rogankov, "Asymmetry of Nucleation in Metastable Vapor and Liquid Phases". in "Nucleation Theory and Application" edited by J.Schmelzer, V.Priezjev and G.Ropke, Dubna 2011, part VIII.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Тітлов Олександр Сергійович

Перелік осіб-виконавців

Іщук В.М.

Вереїтіна І.А.

Жмуренко О.І.

Левченко В.І.

Марченко В.Г.

Мезіна О.І.

Чікункова Т.О.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

