

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U031873

Державний реєстраційний номер: 0123U102729

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-06-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розроблення теоретичних підходів, що поєднують теорію масштабної частинки та асоціативне середньо-сферичне наближення для опису заряджених сфероциліндричних молекул у невідпорядкованій пористій матриці. Комп'ютерне моделювання фазової поведінки в системі із зарядженими сфероциліндричними та зарядженими ланцюговими іонами у невідпорядкованому пористому середовищі.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 06.2024

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.): 579.900
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фазова поведінка іонних рідин у невідпорядкованому просторовому обмеженні

Назва роботи англійською:

Phase behaviour of ionic liquids in a disordered confinement

Реферат українською:

Метою наукової роботи є розробка теорії фазових переходів іонних рідин із складною будовою молекулярних іонів в умовах невідпорядкованого просторового обмеження, сформованого матрицею нерухомих частинок пористого матеріалу. Для її реалізації, впродовж цього етапу, розроблено теоретичний підхід для опису термодинамічних властивостей іонної рідини у невідпорядкованому пористому середовищі з молекулярними катіонами, представленими зарядженими жорсткими сфероциліндрами із зарядом, розміщеним на одному з кінців сфероциліндра. Підхід поєднує узагальнення теорії масштабної частинки і асоціативне середньосферичне наближення. Для системи «іонна рідина-матриця» отримано аналітичні вирази для вільної енергії, тиску і хімічних потенціалів, які містять внесок від системи відліку, представленої двокомпонентною сумішшю твердих сфероциліндрів і твердих сфер, що знаходиться у матриці невідпорядкованих незаряджених твердих сфер та внесок від іонної підсистеми, представленої сумішшю вільних іонів та іонних пар, які перебувають у хімічній рівновазі згідно закону діючих мас. Отримано явний вигляд системи нелінійних рівнянь для визначення ступеня дисоціації іонів і параметра екранування Блюма. Використовуючи метод Монте-Карло, проведено серію комп'ютерного моделювання еквімолярної суміші позитивно заряджених твердих сфероциліндричних частинок (катіонів) та негативно заряджених сфер в об'ємі і в матриці різної пористості. Розраховано радіальні функції розподілу та ступені зв'язаності між катіонами і аніонами при різних густинах та температурах. Проведено порівняння із результатами теорії та аналогічними системами, де в ролі катіона взято гнучкі і жорсткі ланцюги еквівалентної довжини. Показано, що критична температура та критична густина в системах із сфероциліндричними катіонами знижуються із зменшенням пористості матриці та є нижчою ніж у випадку ланцюгових катіонів.

Реферат англійською:

The aim of the research work is to develop a theory of phase transitions in ionic liquids with complex structures of molecular ions under conditions of disordered spatial confinement formed by a matrix of immobile particles of porous material. To achieve this, during this stage, a theoretical approach is developed to describe the thermodynamic properties of an ionic liquid in a disordered porous medium with molecular cations represented by charged rigid spherocylinders with a charge located at one end of the spherocylinder. The approach combines the generalization of scaled particle theory and the associative mean spherical approximation. For the "ionic liquid-matrix" system, analytical expressions for the free energy, pressure, and chemical potentials are obtained, which include contributions from the reference system represented as a two-component mixture of hard spherocylinders and hard spheres confined in a matrix of disordered uncharged hard spheres, as well as contributions from the ionic subsystem represented as a mixture of free ions and ion pairs being in chemical equilibrium according to the mass action law. An explicit form of the system of nonlinear equations is derived to determine the degree of ion dissociation and Blum's screening parameter. Using the Monte Carlo method, a series of computer simulations are carried out on an equimolar mixture of positively charged hard spherocylindrical particles (cations) and negatively charged spheres in both bulk and matrices of different porosity. Radial distribution functions and binding degrees between cations and anions are calculated at different densities and temperatures. Comparisons are made with theoretical results and similar systems where cations are flexible and rigid chains of equivalent length. It was shown that the critical temperature and critical density in the systems with spherocylindrical cations decrease with reduced matrix porosity and are lower than those in the systems with

chain cations.

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: Проміжний науково-технічний звіт за етап 3

Назва НТП англійською: Scientific report for stage 3

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: Розроблено теоретичний підхід для опису термодинамічних властивостей іонної рідини з молекулярними катіонами, представленими зарядженими жорсткими сфероциліндрами із зарядом, розміщеним на одному з кінців сфероциліндра, що знаходиться у пористому середовищі, сформованому нерухомими хаотично розташованими твердими сферами. Використовуючи метод Монте-Карло, проведено розрахунки точок співіснування фазового переходу газ-рідина для моделі іонної рідини в пористій матриці із молекулярними катіонами, представленими зарядженими твердими сфероциліндрами.

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

T. Hvozď, T. Patsahan, Yu. Kalyuzhnyi, O. Patsahan, M. Holovko, Vapour--liquid phase behaviour of primitive models of ionic liquids confined in disordered porous media, Condens. Matter Phys. 2024, 27, No 2, p. 23602.

Х. 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**

