

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U013077

Державний реєстраційний номер: 0111U005214

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах - рідких кристалах і спиртах

Початок етапу: 07.2011

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітнього 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, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 526 45 87

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

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): 5031050

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 90

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах – рідких кристалах і спиртах

Назва роботи англійською:

Spectral manifestations of nano-scale structure transformations in partly ordered liquids – liquid crystals and alcohols

Реферат українською:

Зареєстровано Фур'є-спектри інфрачервоного поглинання одноатомних спиртів (метилового, етилового, пропілового, гексилового, бутилового і трет-бутилового), ізольованих в охолоджених аргонових матрицях. Показано поступове перетворення мономерів (окремих молекул спиртів) у кластерну структуру, що відбувається з підвищенням температури аргонної матриці. Виконані квантово-хімічні розрахунки просторової структури та енергетичних параметрів спиртових кластерів, а також їхніх коливальних спектрів. Отримані нами величини узгоджуються з відомими літературними даними, що свідчить про коректність обраної нами розрахункової моделі, і дають можливість більш точно інтерпретувати отримані експериментальні дані. Завдяки проведеним квантово-хімічним розрахункам було виконано віднесення всіх зареєстрованих смуг інфрачервоного поглинання спиртів, визначено смуги, які належать мономерам, різним конформерам димерів і тримерів, а також кластерам більш високих порядків.

Реферат англійською:

FTIR spectra of monohydric alcohols (methanol, ethanol, propanol, isopropanol, butanol, tret-butanol) trapped in an argon matrix were registered. The gradual transformation of monomers (individaul alcohol molecules) into cluster structure occuring during matrix heating was shown. Quantum-chemical calculations of space structure and energetical parameters of the alcohol clusters as well as their vibrational spectra were carried out. the obtained values correlate with known literature data indicating the adequacy of the chosen model and give the possibility to interpret the obtained experimental data more accurately. Owing to the results of quantun-chemical calculations the assignment of all registered IR absorption bands of the alcohols was made, the bands which belong to monomers, different conformers of dimers and trimers, as well as clusters of higher order were determined.

Індекс УДК: 535.33/.34:621.373.826, 535.33.34; 532

Коди тематичних рубрик: 29.33.49

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерне моделювання молекулярних нанокластерів в органічних сполуках (рідких спиртах та воді).

Назва НТП англійською: Computer simulation of molecular nanoclusters in organic compounds (liquid alcohols and water).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: нормативно-технічна документація

Галузь застосування: фізика

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зареєстровано Фур'є-спектри інфрачервоного поглинання одноатомних спиртів (метилового, етилового, пропілового, гексилового, бутилового і трет-бутилового), ізольованих в охолоджених аргонових матрицях. Показано поступове перетворення мономерів (окремих молекул спиртів) у кластерну структуру, що відбувається з підвищенням температури аргонної матриці. Виконані квантово-хімічні розрахунки просторової структури та енергетичних параметрів спиртових кластерів, а також їхніх коливальних спектрів. Отримані нами величини узгоджуються з відомими літературними даними, що свідчить про коректність обраної нами розрахункової моделі, і дають можливість більш точно інтерпретувати отримані експериментальні дані. Завдяки проведеним квантово-хімічним розрахункам було виконано віднесення всіх зареєстрованих смуг інфрачервоного поглинання спиртів, визначено смуги, які належать мономерам, різним конформерам димерів і тримерів, а також кластерам більш високих порядків. Подібність спектрам при найнижчій температурі матриці спе

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2011

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: фізика

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:

ІХ. Бібліографічний опис

Науковий звіт "Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах - рідких кристалах і спиртах"

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Григорук Валерій Іванович

Перелік осіб-виконавців

Безручко Інна Володимирівна

Голуб Павло Олександрович

Дорошенко Ірина Юріївна

Дорошенко Олена Петрівна

Жовтобрюх Юрій Михайлович

Чернолевська Єлизавета Анатоліївна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

