

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U009485

Державний реєстраційний номер: 0109U001312

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-12-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Піко- та нанорозмірні процеси в іонних рідинах та іон-молекулярних системах як основа новітніх функціональних матеріалів

Початок етапу: 01.2009

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітнього 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, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 705 12 54

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.): 41.5

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Піко- та нанорозмірні процеси в іонних рідинах та іон-молекулярних системах як основа новітніх функціональних матеріалів

Назва роботи англійською:

Pico- and nanoscaled processes in ionic liquid and ion-molecular systems as a basis for novel functional materials

Реферат українською:

Об'єкти дослідження: Вуглецеві нанотрубки (ВНТ); розчини електролітів всередині вуглецевих нанотрубок; розчини нікель хлориду в метанолі; розчини тетраалкіламонієвих солей в ацетонітрилі; імідазолієві іонні рідини. 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 та іонних рідинах. Метод дослідження: ab initio та класичне молекулярно-динамічне моделювання, кондуктометрія, ЯМР спектроскопія. Виміряно електричну провідність розчинів Bu₄NBr і Et₄NBF₄ в ацетонітрилі з концентраціями від 1·10⁻⁴ до 1 моль/дм³ при температурах 5–55°C. За результатами ЯМР експерименту встановлено, що в концентрованих розчинах ТАА солей в ацетонітрилі існують іонні асоціати проникаючого типу. Обґрунтовано необхідність використання квазіґраткової моделі та іонної асоціації для опису електричної провідності розчинів середніх концентрацій. Запропоновано використання функціонала вільної енергії в рамках псевдопотенціальної плоскохвильової теорії функціонала густини для моделювання електронних властивостей нанотрубок. Виконано розрахунки електронної структури ВНТ однакового діаметра з топологіями крісло та зигзаг. Досліджено склад сольватних оболонок Ni²⁺ у метанольних розчинах за допомогою ЯМР спектроскопії на ядрах ¹H, ²H, та ¹³C. На ²H ЯМР спектрі розчинів у CH₃OD вперше знайдено сигнал від OD-груп молекул в ПСО Ni²⁺. Запропоновано новий підхід до розробки моделей для МД моделювання іонних рідин із врахуванням ефектів переносу заряду. Розроблено нові моделі 1-етил-3-метил-імідазолій та 1-бутил-3-метил-імідазолій тетрафлуороборатів. За результатами квантових розрахунків, виконаних з явним врахуванням іонного оточення, було модифіковано заряди іонів. Показано, що нові моделі відтворюють динамічні властивості іонних рідин при різних температурах. За результатами МД моделювання MeOH, AN та DMSO всередині ВНТ встановлено, що коефіцієнти самодифузії молекул розчинників та розчинених іонів у безмежно розведених розчинах всередині вуглецевої нанотрубки монотонно зменшуються зі зменшенням діаметра ВНТ. Встановлено, що динамічні властивості електролітного розчину всередині вуглецевої нанотрубки в цілому визначаються двома факторами: геометрією просторових обмежень та структурою іонної підсистеми обмеженого розчину. На підставі зменшення коефіцієнтів самодифузії іонів Et₄N⁺ і BF₄⁻ рекомендовано використання вуглецевих наноматеріалів з діаметром до 3 нм у якості електродного матеріалу для електрохімічного двошарового суперконденсатора. На підставі аналізу динаміки переорієнтації рідкого диметилсульфоксиду показано, що кріопротекторні властивості DMSO зумовлені значним збільшенням часу переорієнтації молекул рідини за наявності просторових обмежень.

Реферат англійською:

Objects of investigation: carbon nanotubes (CNT); electrolyte solutions inside the carbon nanotubes; nickel chloride solutions in methanol; solutions of tetraalkyl ammonium salts in acetonitrile; imidazolium ionic 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, NMR spectroscopy. Electric conductivities of Bu₄NBr and Et₄NBF₄ acetonitrile solutions with concentrations 1·10⁻⁴ – 1 mol/dm³ were determined at temperatures 5–55°C. From NMR experimental data the

existence of penetrating ionic pairs in concentrated solutions was suggested. Quasilattice model with conjunction with ionic association is proven to be adequate for predicting of conductence of solutions with moderate concentrations. The usage of the free energy functional within plain wave pseudopotential density functional theory framework were adopted for calculation of electronic properties of CNT. Electronic structure of CNTs with topologies armchair and zigzag was calculated. ^1H , ^2H and ^{13}C NMR spectra have been used to test the Ni^{2+} solvation shell composition in methanol solution of NiCl_2 . Using ^2H NMR allowed us to detect for the first time OD-signal of methanol in the primary solvation shell of Ni^{2+} cation. The new phenomenological account for electronic polarization and charge transfer within classical nonpolarizable FF is proposed. Based on the results of our ab initio molecular dynamics calculations using explicit ionic environment, we modified the electrostatic interaction potential of 1-ethyl-3-methylimidazolium and 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborates. The temperature dependencies of transport properties of ionic liquids are well predicted by proposed force-fields. As it follows from the results of the performed molecular dynamics simulations on liquid MeOH, AN and DMSO confined by single-walled carbon nanotubes the translational diffusion coefficient changes continuously with decreasing CNT diameter. Dynamical properties of electrolyte solutions inside CNT are influenced by two factors: the geometry of confinement and the structure of ionic subsystem in solution. On the base of self-diffusion coefficients of Et_4N^+ and BF_4^- inside the CNT considerable decrease carbon nanomaterials with effective diameters of up to 3 nm are suggested as an electrode material for modern electrochemical double-layer supercapacitors. Based on the re-orientational dynamics of liquid DMSO in confinements analysis, it was shown that cryoprotective properties of DMSO are stipulated by the considerable growth of microscopic relaxation times in the presence of spatial confinements.

Індекс УДК: 544.35, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.31

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: Модель для МД моделювання іонних рідин із врахуванням ефектів переносу заряду

Назва НТП англійською: The phenomenological account for electronic polarization and charge transfer within classical nonpolarizable FF is proposed.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Моделі відтворюють динамічні властивості іонних рідин при різних температурах. За результатами МД моделювання MeOH, AN та DMSO всередині ВНТ встановлено, що коефіцієнти самодифузії молекул розчинників та розчинених іонів у безмежно розведених розчинах всередині вуглецевої нанотрубки монотонно зменшуються зі зменшенням діаметра ВНТ. Встановлено, що динамічні властивості електролітного розчину всередині вуглецевої нанотрубки в цілому визначаються двома факторами: геометрією просторових обмежень та структурою іонної підсистеми обмеженого розчину

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2011-2012 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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Залюбовський Ілля Іванович

Перелік осіб-виконавців

Агеєнко В.

В'юник І.

Калугін О.

Колесник Я.

Корсун О.

Кулік Р.

Лукінова О.

Мареха Б.

Чабан В.

Черножук Т.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

