Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0308U003002

Державний реєстраційний номер: 0106U003099

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-02-2008

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Статистична механіка іон-молекулярних систем без та просторовими обмеженнями

Початок етапу: 01.2007

Закінчення етапу: 12.2007

Вид звітного документа: Без звіту

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 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)

Напрям фінансування:

Джерела фінансування

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Динамічна структура та електропровідність іон-молекулярних систем в об'ємній фазі та вуглецевих наноматеріалах

Назва роботи англійською:

Dynamic structure and electric cjnductivity of ion-molecular systems in the bulk phase and carbon nanomaterials

Реферат українською:

Об'єкти дослідження: безмежно розведені розчини солей літію в сумішах пропіленкарбонату (ПК) з диметоксиетаном (ДМЕ); ацетонітрильні розчини електролітів всередині вуглецевих нанотрубок (CNT). Мета роботи: визначення характеристик структури та динаміки іонів і молекул в об'ємній фазі та вуглецевих наноматеріалах та впливу на них інтенсивності міжчастинкових взаємодій та просторових обмежень. Метод дослідження: молекулярно-динамічне моделювання. За результатами моделювання безмежно розведених розчинів Li+ в сумішах ПК - ДМЕ встановлено, що для всіх досліджених систем перша сольватна оболонка Li+ складається з 6 молекул ПК. На відстанях до 0.8 нм катіон Li+ оточено областю, збідненою ДМЕ. За допомогою авторського програмного пакету MDCNT проведено МД моделювання структури та динаміки рідкого AN всередині CNT та в об'ємній фазі. Встановлено, що всередині CNT розчинник (розчин) стає більш структурованим за рахунок виродження одного зі ступенів свободи частинок поблизу геометричних обмежень. Посилення структурованості AN супроводжується зниженням трансляційної рухливості молекул розчинника та іонів Li+, Et4N+, BF4- та збільшенням часу переорієнтації AN. Зі зменшенням діаметру CNT обидва ефекти стають більш вираженими. Характер залежності коефіцієнтів самодифузії Li+, Et4N+, BF4- у нескінченно розведеному розчині в AN від діаметру CNT дає можливість припустити, що динаміка іонів фактично визначається динамікою їх сольватних оболонок.

Реферат англійською:

Objects of investigation: infinitely diluted solutions of lithium salts in mixtures of propylene carbonate with dimethoxyethane; acetonitrile based electrolyte solutions inside the carbon nanotubes. The aim of this work is to determine characteristics of the structure and dynamics of ions and molecules in the bulk phase and inside the carbon nanomaterials and influence of the strength of interparticle interactions and confinements on them.Methods of investigation: molecular dynamics simulation. According to the results of simulation of infinitely diluted solutions of Li+ in mixtures PC-DME it was established, that for all considered systems the first solvation shell of Li+ contains 6 PC molecules. Molecular dynamics simulation of the structure and dynamics of liquid AN in the bulk and inside CNT was made by MDCNT package. It was determined, that inside CNT solvent (solutions) becomes more structured due to the degeneration of one freedom degree near the walls. Structuring of AN is accompanying by decreasing of translational mobility of solvent molecules and Li+, Et4N+, BF4- ions and also by increasing of reorientation times of AN molecules. Both effects become more pronounced when CNT diameters decrease.

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)

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Залюбовський Ілля Іванович

Перелік осіб-виконавців

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності