Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100095

Державний реєстраційний номер: 0119U102996

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження впливу розчинника на фазову поведінку в простих іонних рідинах; Вивчення фазових переходів між ізотропною та нематичною фазами та фазові переходи змішування-незмішування в бінарних сумішах видовжених жорстких молекул; Дослідження кластеризації в розчинах сітко-утворюючих рідин; Дослідження фазових переходів в розчинах реактивних мономерів; Вивчення процесів адсорбції та розшарування в розчинах реактивних мономерів.

Початок етапу: 07.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0322761978

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444814763

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: 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.): 140

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Адсорбція плинів та хімічні реакції в пористих матеріалах

Назва роботи англійською:

Fluid Adsorption and Chemical Reactions in Porous Materials

Реферат українською:

Проект присвячений вивченню рівноважних властивостей простих і складних рідин адсорбованих в пористих середовищах. Для цього, на основі статистико-механічних теорій розвинуто та застосовано відповідні теоретичні підходи для опису термодинамічних властивостей простих, іонних, нематогенних та асоціативних молекулярних систем. Запропоновано опис фазових діаграм, які відображають умови переходу досліджуваних систем із газоподібного стану в рідкий, а також фазові переходи типу розшарування в іонних розчинах та явища кластеризації білкових сполук. Крім стандартних фазових переходів типу газ-рідина в однокомпонентних рідинах або рідина-рідина для сумішей, вивчено умови виникнення переходів між ізотропною та нематичною фазами в рідкокристалічних системах. Зокрема, показано, що пористе середовище і тиск сприяють виникненню нематичних фаз в сумішах іонів та рідкокристалічних молекул. А при фіксованому тиску, зменшення пористості спричинює ріст критичної температури фазового переходу рідина-рідина. Для простих рідин встановлено, що поведінка критичної температури, в залежності від притягання між молекулами та пористим середовищем, має немонотонний характер. Білкові молекули імуноглобуліну, володіючи реактивним групами, здатні утворювати зв'язки між собою і, тим самим, формувати молекулярні кластери. В таких системах молекул ми дослідили фазову поведінку газ-рідина при різних значеннях пористостей матриці.

Реферат англійською:

The project is devoted to a study of the equilibrium properties of simple and complex liquids adsorbed in porous media. To this end, on the basis of statistical-mechanical theories the corresponding theoretical approaches have been developed and applied to describe the thermodynamic properties of simple, ionic, nematogenic and associative molecular systems. Analytical expressions were obtained and the chemical potential dependencies on density and temperature were calculated numerically, and the confinement effects of a disordered porous matrix was studied. We have obtained phase diagrams describing the phase transitions of considered systems from the gaseous to liquid state, liquid-liquid separation phase transitions in ionic solutions and mixtures. The clustering phenomena of proteins have been considered as well. Besides that, the conditions of isotropic-nematic phases transition in liquid crystal systems have been explored. In particular, it is shown that the porous medium and pressure favour the formation of nematic phases in mixtures of ions and liquid crystal molecules. And at a fixed pressure, a decrease in the porosity causes an increase in the critical temperature of the liquid-liquid phase transition. It is also found for simple liquids that the behavior of their critical temperature, depending on the attraction between the molecules and the porous medium, has a non-monotonic behaviour. Protein molecules of immunoglobulin can associate with each other due to their reactive groups, thus formation of molecular clusters can appear. In such systems of molecules, we investigated the gas-liquid phase transitions at different values of the matrix porosity.

Індекс УДК: 536.75

Коди тематичних рубрик: 29.17.41

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Головко Мирослав Федорович

Науковий ступінь:д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор, член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теоретичні підходи для опису термодинамічних властивостей та фазових переході в системах простих та складних рідин, адсорбованих в невпорядкованому пористому середовищі

Назва НТП англійською: Theoretical approaches for the description of thermodynamic properties and phase behaviour in systems of simple and complex liquids adsorbed in disordered porous medium

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Каталіз, адсорбенти, зелена енергетика, очистка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено теоретичні підходи для опису термодинамічних властивостей та фазових переходів в системах простих, іонних, нематогенних та асоціативних молекулярних рідин, адсорбованих в невпорядкованому пористому середовищі матриці. Отримано аналітичні вирази та чисельно розраховано залежності хімічного потенціалу від густини і температури, а також побудовано відповідні фазові діаграми для досліджуваних систем при різних параметрах матриці. За результатами, отриманими в даному проекті, одну статтю опубліковано та дві статті прийнято до друку в журналах із високим рейтингом, а також опубліковано троє тез конференцій міжнародного рівня.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 07.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції: В галузі фізики та хімії рідин і пористих матеріалів

Перспективні ринки: Україна, Китай, ЄС

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

M. Hvozd, T. Patsahan, O. Patsahan, M. Holovko. Fluid-fluid phase behavior in the explicit solvent ionic model: Hard spherocylinder solvent molecules. J. Mol. Liq., 285 (2019) 244-251.

A.K. Nelson, Y.V. Kalyuzhnyi, T. Patsahan, C. McCabe, Liquid-vapor phase equilibrium of a simple liquid confined in a random porous media: Second-order Barker-Henderson perturbation theory and scaled particle theory, 2020 (прийнято до друку).

M.F. Holovko, V.I. Shmotolokha, On the generalization of the Van der Waals approach for the isotropic-nematic fluid phase equilibria of anisotropic fluids in a disordered porous medium, Condens. Matter Phys., 23 (1), 2020 (прийнято до друку).

M. Hvozd, T. Patsahan, O. Patsahan, M. Holovko. Fluid-fluid phase behavior in the explicit hard spherocylinder solvent ionic model confined in a disordered porous medium. In the book of abstracts of 5-th Conference on Statistical Physics: Modern trends and applications, Lviv, July 3-6, 2019, p. 116.

V. Shmotolokha, M. Holovko. Generalization of the Van der Waals equation for anisotropic fluid in a disordered porous medium. In the book of abstracts of 5-th Conference on Statistical Physics: Modern trends and applications, Lviv, July 3-6, 2019, p. 153.

T. Patsahan, M. Hvozd, O. Patsahan, M. Holovko. Recent progress in the theoretical description of fluid-fluid phase behavior in the explicit solvent ionic model. In the book of abstracts of III CONIN workshop “System with competing electrostatic and short-range interactions”. 1-2 July 2019, Ukraine, Lviv, p. 18.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Мриглод Ігор Миронович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Гвоздь Марта Валентинівна
(01.04.24)

Гвоздь Тарас Валентинович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Головко Мирослав Федорович
(д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.02, 01.04.24, 01.04.24)

Калюжний Юрій Володимирович
(д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.24)

Пацаган Тарас Миколайович
(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Шмотолоха Володимир Ігорович
(01.04.24)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Пацаган Т.М.

Телефон — +38 (032) 276-06-14

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

