

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U031511

Державний реєстраційний номер: 0122U001972

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-05-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Аналіз впливу зовнішніх факторів на фазові переходи та кінетичні процеси в нанорозмірних молекулярних системах.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Проміжний 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: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333, 380442393230

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 Берестейський, 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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 960.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фазові переходи та кінетичні властивості молекулярних систем з просторовими нанонеоднорідностями, актуальних для екологічної безпеки і медицини

Назва роботи англійською:

Phase transitions and kinetic properties of molecular systems with spatial nanohomogeneities relevant to environmental safety and medicine

Реферат українською:

Запропонована нова термодинамічна модель плавлення нанокристалів в оточенні твердої матриці та загальна модель релаксацийних процесів в них. Запропоновані моделі дозволяють вперше визначити такі параметри нанокристалів як: густину, величину структурних напружень, поверхневі енергію та ентропію нановключень. Створена нова, більш чутлива експериментальна фотоакустична методика дослідження температурних та термопружних збурень в структурах на основі гелів та запропоновано новий механізм формування фотоакустичного відгуку в ній пов'язаний з періодичною термопружною деформацією полімерної мембрани в полі температурної хвилі. Показано, релаксацийні процеси в твердих системах целюлоза - вода та заміщена целюлоза-вода з домішками іонів є результатом суперпозиції ряду релаксацій. Двох діелектричних релаксацій у чистому льоді, обумовлених рухом орієнтаційних L та D дефектів Б'єрума і іонних пар дефектів H_3O^+ та OH^- . Діелектричної релаксації в кластерах солоного льоду, пов'язаною з гідратними оболонками іонів Na^+ та Cl^- . Діелектричної релаксації поверхневих гідратних оболонках нано-кристалів целюлози (НЦ) та молекул заміщеної целюлози (ГПЦ). Молекулярний механізм останньої пов'язаний з конформаційною переорієнтацією метилольних груп в НЦ та метоксипропокси груп в ГПЦ які пов'язані водневими зв'язками з гідратною оболонкою. Додавання іонів в розчин призводить часткового блокування утворення гідратних оболонок, що призводить до зміни положення області діелектричної релаксації, енергії та ентропію активації процесів.

Реферат англійською:

A new thermodynamic model for the melting of nanocrystals within a solid matrix and a comprehensive model for studying relaxation processes therein have been presented. For the first time, these models allow the determination of characteristics such as the density, magnitude of structural stress, surface energy, and entropy of nano-inclusions in nanocrystals. An advanced experimental photoacoustic technique for analyzing temperature changes and thermoelastic disturbances in gel-based structures has been developed, along with a new theory on the mechanism of photoacoustic response formation in such systems. This photoacoustic response is associated with the periodic thermoelastic deformation of the polymer membrane under the influence of temperature waves. It has been discovered that relaxation processes in solid cellulose-water systems and substituted cellulose-water systems with ionic impurities result from a superposition of several types of relaxations. These include two dielectric relaxations in pure ice caused by the motion of a) orientational L and D Bjerrum defects and b) ion pairs of defects H_3O^+ and OH^- ; c) dielectric relaxation in salt ice clusters associated with the hydrate shells of ions Na^+ and Cl^- , and d) dielectric relaxation in the external hydrate shells of nanocrystal cellulose and substituted cellulose molecules. The molecular mechanism of the last dielectric relaxation process is related to the conformational changes of methoxyl groups on the surface of cellulose nanocrystals and methoxypropoxy groups in substituted cellulose molecules, which are hydrogen-bonded to the hydrate shell. The addition of ions to the solution leads to partial blocking of the formation of hydrate shells, which results in changes to the position of the dielectric relaxation region, energy, and entropy of the activation processes.

Індекс УДК: 532; 533; 536; 538.9

Коди тематичних рубрик:29.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лазаренко Максим Михайлович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Експериментальна фотоакустична методика

Назва НТП англійською: Experimental photoacoustic technique

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Моделі впливу різних зовнішніх фізичних факторів

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створена нова, більш чутлива експериментальна фотоакустична методика дослідження температурних та термопружних збурень в структурах на основі гелів та запропоновано новий механізм формування фотоакустичного відгуку в ній пов'язаний з періодичною термопружною деформацією полімерної мембрани в полі температурної хвилі. Показано, релаксацийні процеси в твердих системах целюлоза - вода та заміщена целюлоза-вода з домішками іонів є результатом суперпозиції ряду релаксацій. Двох діелектричних релаксацій у чистому льоді, обумовлених рухом орієнтаційних L та D дефектів Б'єрума і іонних пар дефектів H_3O^+ та OH^- . Діелектричної релаксації в кластерах солоного льоду, пов'язаною з гідратними оболонками іонів Na^+ та Cl^- . Діелектричної релаксації поверхневих гідратних оболонках нано-кристалів целюлози (НЦ) та молекул заміщеної целюлози (ГПЦ). Молекулярний механізм останньої пов'язаний з конформаційною переорієнтацією метилольних груп в НЦ та метоксипропоксигруп в ГПЦ які пов'язані водневими зв'язками з гідратною оболонкою. Додавання іонів в розчин призводить часткового блокування утворення гідратних оболонок, що призводить до зміни положення області діелектричної релаксації, енергії та ентропії активації процесів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: 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

Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних - 9; публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях, що не включені до переліку наукових фахових видань України - 3; монографії та розділи монографій, опубліковані у закордонних видавництвах іноземними мовами - 2; монографії та розділи монографій, опубліковані в українських видавництвах - 1; міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції - 1; заявок на державні, міжнародні наукові гранти - 2.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Алексеев Сергій Олександрович
(к. х. н., 02.00.01)

Алексеев Олександр Миколайович
(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Андрусенко Дмитро Анатолійович
(к. ф.-м. н.)

Вергун Лена Юріївна
(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Гнатюк Катерина Іванівна

Ковальчук Валерій Інокентійович
(к. ф.-м. н.)

Огородник Катерина Олегівна

Сосновська Марія Олександрівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бурих А.А.

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

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

