

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100930

Державний реєстраційний номер: 0117U005019

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Механізми та моделі впливу зовнішніх факторів на молекулярні процеси у м'якій речовині

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

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: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2393141

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, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201290

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 3350.3

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив зовнішніх фізичних факторів на молекулярні процеси у м'якій речовині, актуальні для ядерної енергетики, медицини та природозберігаючих технологій.

Назва роботи англійською:

The influence of external physical factors on molecular processes in soft matter relevant to nuclear energy, medicine and environmental technologies.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – механізми впливу зовнішніх фізичних факторів на рівноважні та кінетичні властивості м'якої речовини, а саме у рідинних системах (зокрема, магнітних та іонних), у медико-біологічних системах (модельні розчини та системи організму), у полімерних системах із нанодомішками. Мета роботи – з'ясування механізмів впливу зовнішніх факторів (температури, тиску, гравітаційного поля землі, кривизни та стану поверхні міжфазних границь, електромагнітного, у тому числі рентгенівського, випромінювання, нейтронного опромінення) на структуру, рівноважні та кінетичні властивості м'якої речовини (рідинних систем, іонних рідин, наноструктур, полімерів, медико-біологічних об'єктів). Методи дослідження: акустичні, оптичні, п'єзометричні, діелектричні, калориметричні, віскозиметричні, комп'ютерного моделювання, теоретико-аналітичні. Проведений аналіз комп'ютерного експерименту з визначення теплофізичних характеристик рідких аренів. Була перевірена можливість одержання рівноважних просторових структур усіх існуючих конформерів молекул для ряду речовин з кількісною оцінкою похибки моделювання внутрішньомолекулярних електростатичних взаємодій. Були досліджені структурно-динамічні особливості нескінченно розбавлених рідинних систем «іонна рідина – dmim⁺/Cl⁻ – ароматичний вуглеводень». Встановлений зв'язок між характеристиками адсорбції між двовимірною рідиною та двовимірним газом, характеристиками двовимірного фазового переходу та характером залежності потенціалу міжмолекулярної взаємодії. Розроблений алгоритм, що дозволяє будувати розширені рівняння стану неідеальних розчинів. Проведений аналіз впливу обмеженого простору нанопор кремнієвої матриці на фазові перетворення в 1-октаедрі. Пояснена залежність електропровідності рідинних систем з нанотрубками від концентрації лапоніту. Запропонована модель структури водних розчинів гідроксипропілцелюлози з концентраціями до 1.5 г/л. Запропонована модель процесу електропровідності у водних розчинах альбуміну.

Реферат англійською:

Object of study – mechanisms of influence of external physical factors on the equilibrium and kinetic properties of a soft substance, namely in liquid systems (in particular, magnetic and ionic), in medical and biological systems (model solutions and systems of the body), in polymeric systems with nanodimensions. The purpose of the work is to find out the mechanisms of influence of external factors (temperature, pressure, gravitational field of the earth, curvature and surface state of interfacial boundaries, electromagnetic, including X-ray, radiation, neutron radiation) on the structure, equilibrium and kinetic properties of soft matter (fluid systems, ionic liquids, nanostructures, polymers, biomedical objects). Research methods: acoustic, optical, piezometric, dielectric, calorimetric, viscometric, computer simulation, theoretical and analytical. A computer experiment was conducted to determine the thermophysical characteristics of liquid arenas. The possibility of obtaining equilibrium spatial structures of all existing conformers of molecules for a number of substances with a quantitative estimation of the error of modeling of intramolecular electrostatic interactions was tested. Structural-dynamic features of infinitely diluted liquid systems "ionic liquid – dmim⁺ / Cl⁻ – aromatic hydrocarbon" were investigated. The relation between adsorption characteristics between two-dimensional liquid and two-dimensional gas, characteristics of two-dimensional phase transition and character of dependence of potential of intermolecular interaction were established. An algorithm is developed that allows to build extended equations of state of non-ideal solutions. The

influence of the limited space of the nanopores of the silicon matrix on the phase transformations in 1-octadecene is analyzed. The dependence of the electrical conductivity of liquid systems with nanotubes on the concentration of laponite is explained.

Індекс УДК: 53.09, 538.9-404:53.09

Коди тематичних рубрик: 29.03.53

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Булавін Леонід Анатолійович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Моделі та механізми впливу зовнішніх факторів на молекулярні процеси у м'якій речовині.

Назва НТП англійською: Models and mechanisms of influence of external factors on molecular processes in soft matter.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: моделі та молекулярні механізми

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведений аналіз комп'ютерного експерименту з визначення теплофізичних характеристик рідких аренів. Була перевірена можливість одержання рівноважних просторових структур усіх існуючих конформерів молекул для ряду речовин з кількісною оцінкою похибки моделювання внутрішньомолекулярних електростатичних взаємодій. Були досліджені структурно-динамічні особливості нескінченно розбавлених рідинних систем «іонна рідина - dmim⁺/Cl⁻ - ароматичний вуглеводень». Встановлений зв'язок між характеристиками адсорбції між двовимірною рідиною та двовимірним газом, характеристиками двовимірного фазового переходу та характером залежності потенціалу міжмолекулярної взаємодії. Розроблений алгоритм, що дозволяє будувати розширені рівняння стану неідеальних розчинів. Проведений аналіз впливу обмеженого простору нанопор кремнієвої матриці на фазові перетворення в 1-октаедрі. Пояснена залежність електропровідності рідинних систем з нанотрубками від концентрації лапоніту. Запропонована модель структури водних розчинів гідроксипропілцелюлози з концентраціями до 1.5 г/л. Запропонована модель процесу електропровідності у водних розчинах альбуміну. Розроблено метод мінімізації дозового навантаження на пацієнта при комп'ютерній томографії зі збереженням діагностичної цінності отриманих зображень. Визначені основні особливості багаторівневої структурної організації водних суспензій детонаційних наноалмазів із розширеним застосуванням малокутових методів розсіювання.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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 обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Опубліковано: 2 монографії, 7 розділів в монографіях, 43 статті та 45 тез доповідей на наукових конференціях.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мартинюк Віктор Семенович

Перелік осіб-виконавців

Алексеев Олександр Миколайович

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Андрусенко Дмитро Анатолійович

(к. ф.-м. н.)

Артикульний Олександр Петрович

Атамась Наталія Олексіївна

(д. ф.-м. н.)

Бакуменко Марина Юріївна

Бардик Віталій Юрійович

(к. ф.-м. н.)

Британ Андрій Васильович

(к. ф.-м. н.)

Булавін Леонід Анатолійович

(д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.16)

Бур'ян Сергій Анатолійович

(к. ф.-м. н.)

Василюк-Зайцева Світлана Володимирівна

Вербінська Галина Миколаївна

(к. ф.-м. н.)

Вергун Лена Юріївна

(к. ф.-м. н.)

Гаврюшенко Дмитро Анатолійович

(д. ф.-м. н., 01.04.14)

Голик Юрій Сергійович

Гребньов Олег Анатолійович

Григор'єв Андрій Миколайович

(к. ф.-м. н.)

Забашта Юрій Федосійович

(д. ф.-м. н., 01.04.19)

Кизима Олена Анатоліївна

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Клещонок Тетяна Володимирівна

Ковальчук Валерій Інокентійович

(к. ф.-м. н.)

Косячкін Єгор Миколайович

Кузовков Юрій Гнатович

(к. ф.-м. н., 01.04.15)

Лазаренко Максим Михайлович

(к. ф.-м. н.)

Марков Ігор Володимирович

Нагорна Тетяна Валеріївна

Нагорний Анатолій Васильович

(к. ф.-м. н.)

Ніколаєнко Тимофій Юрійович

(к. ф.-м. н.)

Огороднік Катерина Олегівна

Остапченко Сергій Григорович

Петренко Віктор Іванович

(к. ф.-м. н.)

Рудніков Євген Григорович

(к. ф.-м. н.)

Свечнікова Оксана Сергіївна

(к. ф.-м. н.)

Ткачов Сергій Юрійович

(к. ф.-м. н.)

Томчук Олександр Васильович

(к. ф.-м. н.)

Черевко Костянтин Володимирович

(к. ф.-м. н.)

**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**

