Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0126U003298

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-03-2026

II. Підстава для проведення робіт

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрям фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження ()

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

У тому числі по роках:	
2026	2987.503 тис. грн.
2027	1873.175 тис. грн.
2028	1881.171 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 6741.849 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, Київ, 01001, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442981629

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380322761158, 380322761978

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Функціональна ефективність складногалужених полімерів у застосуваннях пов'язаних з адсорбцією: комп'ютерне моделювання та передбачення

Назва роботи англійською:

Functional efficiency of complex multibranched polymers in adsorption-based applications: computer simulations and predictions

Мета роботи українською:

Розробка та узагальнення методів статистичної фізики, що базуватиметься на поєднанні методів комп'ютерного моделювання та теорії складних мереж, застосування цих методів до адсорбції органічних або неорганічних молекул та іонів складногалуженими полімерними адсорберами, та прогнозування оптимальних молекулярних архітектур для останніх. Такі процеси знаходять своє застосування в численних сферах: екстракція полютантів, каталітична детоксикація, очищення стічних вод тощо. Усі вони мають практичну актуальність та велике значення через поточні екологічні проблеми в Україні, спричинені забрудненням як промисловим виробництвом, так і військовими діями. Крім того, дефіцит прісної води є важливою проблемою в усьому світі, і розробка ефективних циклів очищення води має високий пріоритет у розвинених європейських країнах. Ще однією важливою галуззю є біомедицина та біотехнологія, а саме доставка ліків та детоксикація організму людини. Усі ці застосування вимагають розробки нових та ефективніших адсорберів. Ми розглянемо широкий спектр складногалужених молекулярних архітектур (зіркоподібні, щіткові та дендритні макромолекули, мікрогелі, аморфні металоорганічні каркаси). За допомогою комп'ютерного моделювання ми дослідимо їхні розміри, форму та внутрішню структуру, а також ефективність адсорбції залежно від типу та деталей молекулярної архітектури адсорбера. Моделювання буде проводитися на мезоскопічних масштабах, де полімери демонструють універсальність у своїй поведінці, незалежно від хімічних деталей як полімеру, так і адсорбованих частинок. Наші передбачувані числові результати нададуть рекомендації експериментаторам щодо керованого хімічного синтезу ефективних полімерних абсорбентів з точки зору молекулярної маси, молекулярної архітектури, пористості та геометричної форми адсорбантів. Ці результати будуть обговорені з експериментальними групами на семінарах, організованих протягом терміну дії проекту.

Мета роботи англійською:

To develop and generalize statistical physics methods based on the combination of computer simulation techniques and the theory of complex networks, to apply these methods to adsorption of organic or inorganic molecules and ions by multibranched polymeric adsorbers, and to predict the optimal molecular architectures for the latter. Such processes are found in numerous applications: extractions of pollutants, catalytic detoxification, wastewater purification, etc. All these have practical relevance and significance because of the current ecological problems in Ukraine caused both by industrial and warfare-related pollution. On top of that, a shortage of a fresh water supply is a common problem worldwide and the attention to efficient water purification cycles are of high priority in developed European countries. Another important area is biomedicine and biotechnology, namely drug delivery and detoxification of the human body. All these applications call for developing new and more efficient adsorbers. We will consider a wide range of multibranched molecular architectures (star, brush, and dendritic macromolecules, microgels, amorphous metal-organix frameworks). By undertaking computer simulations, we examine their dimensions, shape, and internal structure, as well as adsorbing efficiency, depending on the type and details of molecular architecture of adsorber. Modelling will be undertaken on the mesoscopic length scale where the polymers demonstrate universality in their behavior, independently of the chemical details of both polymer and adsorbed particles. Our intended numerical results will provide recommendations for experimentalists concerning the steered chemical synthesis of efficient polymer absorbers in terms of molecular weight, molecular architecture, porosity, and the geometric shape of adsorbants. These results will be discussed with experimental groups on the workshops organized throughout the term of the Project

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: Фундаментальні наукові дослідження

Очікувані результати: Методи, теорії, гіпотези; Аналітичні матеріали

Галузь застосування: Дослідження в галузі природничих наук

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ільницький Ярослав Миколайович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-1868-5648

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка та валідація симуляційних моделей та узагальнення числових методів для дослідження складногалужених полімерів

Початок етапу: 03.2026

Закінчення етапу: 11.2026

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Комп'ютерне моделювання моделей складногалужених полімерів та з'ясування ролі особливостей галуження на адсорбційну ефективність

Початок етапу: 03.2027

Закінчення етапу: 11.2027

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 3

Назва етапу: Удосконалення та збагачення додатковими характеристиками комп'ютерних симуляційних моделей для складногалужених полімерів, розроблених у ЕВП 1 та досліджених у ЕВП 2, формулюванн загальних пропозицій щодо хімічного синтезу полімерних адсорберів з високою ефективністю.

Початок етапу: 03.2028

Закінчення етапу: 11.2028

Вид звітного документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 532;533;536;538.9, 678.74/.86, 53.072;53:004

Коди тематичних рубрик: 29.17, 31.25.15.05

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Брик Тарас Михайлович
д. ф.-м. н., професор, член-кор. НАН України, 01.04.02

Відповідальний за підготовку облікових документів Бзовська Ірина Степанівна

Телефон 0992717354

Реєстратор Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Тетяна Анатоліївна