

# Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0119U102996

Відкрита

Дата реєстрації: 09-09-2019

Статус виконавця: 17 - головний виконавець



## 1. Загальні відомості

**Підстава для проведення робіт:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**КПКВК:** 2201380

**Напрямок фінансування:** 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Загальний обсяг фінансування (тис. грн.):** 140

**У тому числі по роках (тис. грн.):**

Рік	Фінансування
2019	140

## 2. Замовник

**Назва організації:** Міністерство освіти і науки України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 38621185

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

**Підпорядкованість:** Кабінет Міністрів України

**Телефон:** 380444814763

**Телефон:** 380444813221

**E-mail:** mon@mon.gov.ua

## 3. Виконавець

**Назва організації:** Інститут фізики конденсованих систем НАН України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 05540014

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Адреса:** вул. Свенціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Телефон:** 0322761978

**E-mail:** icmp@icmp.lviv.ua

## 4. Співвиконавець

## 5. Науково-технічна робота

## Назва роботи (укр)

Адсорбція плинів та хімічні реакції в пористих матеріалах

## Назва роботи (англ)

Fluid Adsorption and Chemical Reactions in Porous Materials

## Мета роботи (укр)

Метою роботи є дослідження рівноважних властивостей сумішей складних рідин адсорбованих в пористих матеріалах. Для цього, на базі статистико-механічних теорій буде розвинуто та застосовано відповідні теоретичні підходи, які здатні описувати термодинамічні властивості іонних, нематогенних та реактивних молекулярних систем. Для них буде отримано аналітичні вирази та чисельно пороховано залежності хімічного потенціалу від густини і температури та вивчено вплив на них просторового обмеження у вигляді неупорядкованої пористої матриці. Із отриманих результатів буде побудовано фазові діаграми, що відображатимуть умови переходу досліджуваних сумішей із газоподібного стану в рідкий, для нематогенних рідин із ізотропного в нематичний стан, а також фазові переходи розшарування (розділення) та кластеризації. Для реактивних молекул буде досліджено вплив пористої матриці на їх реактивну здатність та вияснено при цьому роль різного роду розчинників.

## Мета роботи (англ)

The aim of the study is to investigate the equilibrium properties of mixtures of complex liquids adsorbed in porous materials. To this end, appropriate theoretical approaches will be developed and applied on the basis of statistical-mechanical theories, capable of describing the thermodynamic properties of ionic, nematogenic and reactive molecular systems. Analytical expressions will be obtained for them, and the chemical potential dependence on density and temperature will be numerically calculated, and the confinement effects of a disordered porous matrix will be studied. From the obtained results, phase diagrams will be built in order to explore conditions of phase transitions appearing in the mixtures under study, in particular from the vapour to liquid state, for nematogenic liquids from the isotropic to nematic state, also the phase separation and clustering processes will be considered in this study. The effect of porous matrix on the reactivity of molecules will be investigated and the role of different solvents will be determined.

**Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності:** Нові речовини і матеріали

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Вид роботи:** 39 - фундаментальна

**Очікувані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Каталіз, адсорбенти, зелена енергетика, очистка

## Експерти

Держко Олег Володимирович (д. ф.-м. н., с.н.с.)

## 6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	07.2019	12.2019	Остаточний звіт	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.

## 7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.17.41

Індекс УДК: 536.75

## 8. Заключні відомості

**Керівник організації:**

Мриглод Ігор Миронович (д. ф.-м. н., с.н.с., акад.)

**Керівники роботи:**

Головко Мирослав Федорович (д. ф.-м. н., професор, член-кор.)

**Відповідальний за подання документів:** Пацаган Тарас Миколайович (Тел.: +38 (032) 276-06-14)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.