

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0211U005555

Державний реєстраційний номер: 0110U005162

Відкрита

Дата реєстрації: 04-07-2011



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка теоретичної моделі розрахунку тиску, при якому метан може знаходитись в інтеркаляційному стані у викопному вугіллі, і його кількості

Початок етапу: 06-2010

Закінчення етапу: 12-2010

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії Наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417124

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: Україна, 03680 Київ, вул. Метрологічна, 14-Б

Телефон: 521-34-94

Телефон: 526-59-98

E-mail: itp@bitp.kiev.ua

WWW: www.bitp.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417124

Адреса: вул. Метрологічна, буд.14-Б, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445265362

Телефон: 380445265998

E-mail: itp@bitp.kiev.ua

WWW: http://bitp.kiev.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

КПКВК: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 – фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 – кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 61.6 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Розробка теоретичної моделі розрахунку тиску, при якому метан може знаходитись в інтеркаляційному стані у вкопному вугіллі, і його кількості

Назва роботи (англ)

Development of theoretical models calculation of pressure at which methane can be in intercalation conditions in fossil coals, and its quantity

Реферат (укр)

Методами комп'ютерного моделювання досліджено поведінку і властивості молекули метану та її кластерів у вугільних замкнених нано-порах, що моделюються фулеренами, а саме: C28, C36, C42, C60 та C80. Показано, що утворення ендоедральних фулеренів CH₄@C28, CH₄@C36, CH₄@C42, CH₄@C60 та CH₄@C80, в яких молекула метану знаходиться в середині фулеренової порожнини, є ефектом конфайменту з відповідно позитивною енергією зв'язку. На основі, розрахованих в гармонічному наближенні, коливних спектрів CH₄@фулеренів отримано характеристики властивостей таких систем. Досліджено процеси переносу водню від метану, що знаходиться в фулереновій порі, на внутрішню поверхню фулерену і утворення метилу CH₃. Вивчено ЯМР-властивості метильної CH₃ групи.

Реферат (англ)

Methods of computer modeling of the behavior and properties of molecules of methane and its carbon clusters in closed nano-pores, which are modeled fullerenes, namely: C28, C36, C42, C60 and C80. Shown that the formation of endoedral fullerenes CH₄@C28, CH₄@C36, CH₄@C42, CH₄@C60 and CH₄@C42, in which the methane molecule is in the middle fullerene cavity, is the effect of confinement in accordance with positive energies. On the basis, calculated in harmonic approximation, vibrational spectra of fullerenes CH₄ @ properties, the characteristics of such systems. The processes of transfer of hydrogen from methane, which is in fullerene pore, the inner surface of fullerene and the formation of methyl CH₃. Studied the NMR properties of methyl CH₃ group.

Індекс УДК: 533.9, 539.192 539.194 539.21

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.27

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Модель розрахунку тиску, при якому метан може знаходитись в інтеркаляційному стані у вкопному вугіллі, і його кількості

Назва продукції (англ): Models calculation of pressure at which methane can be in intercalation conditions in fossil coals, and its quantity

Очікувані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Опис продукції (укр): Методами комп'ютерного моделювання досліджено поведінку і властивості молекули метану та її

кластерів у вугільних замкнених нано-порах, що моделюються фулеренами, а саме: C28, C36, C42, C60 та C80. Показано, що утворення ендоедральних фулеренів CH₄@C28, CH₄@C36, CH₄@C42, CH₄@C60 та CH₄@C80, в яких молекула метану знаходиться в середині фулеренової порожнини, є ефектом конфайменту з відповідно позитивною енергією зв'язку. На основі, розрахованих в гармонічному наближенні, коливних спектрів CH₄@фулеренів отримано характеристики властивостей таких систем. Досліджено процеси переносу водню від метану, що знаходиться в фулереновій порі, на внутрішню поверхню фулерену і утворення метилу CH₃. Вивчено ЯМР-властивості метильної CH₃ групи.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: визначаються власником результатів НДР

Виробник продукції: ІТФ НАНУ

Споживачі продукції: науково-дослідні установи, працівники вугільної промисловості

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 21

Мова звіту: Українська

Умови поширення в Україні: Не заборонено

Умови передачі іншим країнам: Не заборонено

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Крячко Євгеній Сергійович

Лоханчук Марина Василіна

Пушкеш Ольга Анатоліївна

Хряпа Валерій Михайлович

Керівник організації:

Загородній Анатолій Глібович (д. ф.-м. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Хряпа Валерій Михайлович

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.