Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0211U013077

Державний реєстраційний номер: 0111U005214

Відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2011

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах - рідких кристалах і спиртах

Початок етапу: 07-2011

Закінчення етапу: 12-2011

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Адреса: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Телефон: 526 45 87

E-mail: pogorelov@univ.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Державне агентство з питань електронного урядування України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 37471818

Адреса: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 2071730

WWW: http://e.gov.ua

4. Джерела та напрями фінансування

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

КПКВК: 5031050

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 90 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах - рідких кристалах і спиртах

Назва роботи (англ)

Spectral manifestations of nano-scale structure transformations in partly ordered liquids - liquid crystals and alcohols

Реферат (укр)

Зареєстровано Фур'є-спектри інфрачервоного поглинання одноатомних спиртів (метилового, етилового, пропілового, гексилового, бутилового і трет-бутилового), ізольованих в охолоджених аргонових матрицях. Показано поступове перетворення мономерів (окремих молекул спиртів) у кластерну структуру, що відбувається з підвищенням температури аргонової матриці. Виконані квантово-хімічні розрахунки просторової структури та енергетичних параметрів спиртових кластерів, а також їхніх коливальних спектрів. Отримані нами величини узгоджуються з відомими літературними даними, що свідчить про коректність обраної нами розрахункової моделі, і дають можливість більш точно інтерпретувати отримані експериментальні дані. Завдяки проведеним квантово-хімічним розрахункам було виконано віднесення всіх зареєстрованих смуг інфрачервоного поглинання спиртів, визначено смуги, які належать мономерам, різним конформерам димерів і тримерів, а також кластерам більш високих порядків.

Реферат (англ)

FTIR spectra of monohydric alcohols (methanol, ethanol, propanol, isopropanol, butanol, tret-butanol) trapped in an argon matrix were registered. The gradual transformation of monomers (individaul alcohol molecules) into cluster structure occuring during matrix heating was shown. Quantum-chemical calculations of space structure and energetical parameters of the alcohol clusters as well as their vibrational spectra were carried out. the obtained values correlate with known literature data indicating the adequacy of the chosen model and give the possibility to interprete the obtained experimental data more accurately. Owing to the results of quantun-chemical calculations the assignment of all registered IR absorption bands of the alcohols was made, the bands which belong to monomers, different conformers of dimers and trimers, as well as clusters of higher order were determined.

Індекс УДК: 535.33/.34:621.373.826, 535.33.34; 532

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.33.49

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Комп'ютерне моделювання молекулярних нанокластерів в органічних сполуках (рідких спиртах та воді).

Назва продукції (англ): Computer simulation of molecular nanoclusters in organic compounds (liquid alcohols and water).

Очікувані результати: нормативно-технічна документація

Галузь застосування: фізика

Опис продукції (укр): Зареєстровано Фур'є-спектри інфрачервоного поглинання одноатомних спиртів (метилового, етилового, пропілового, гексилового, бутилового і трет-бутилового), ізольованих в охолоджених аргонових матрицях. Показано поступове перетворення мономерів (окремих молекул спиртів) у кластерну структуру, що відбувається з підвищенням температури аргонової матриці. Виконані квантово-хімічні розрахунки просторової структури та енергетичних параметрів спиртових кластерів, а також їхніх коливальних спектрів. Отримані нами величини

узгоджуються з відомими літературними даними, що свідчить про коректність обраної нами розрахункової моделі, і дають можливість більш точно інтерпретувати отримані експериментальні дані. Завдяки проведеним квантово-хімічним розрахункам було виконано віднесення всіх зареєстрованих смуг інфрачервоного поглинання спиртів, визначено смуги, які належать мономерам, різним конформерам димерів і тримерів, а також кластерам більш високих порядків. Подібність спектрам при найнижчій температурі матриці спе

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 2011

Виробник продукції: КНУ імені Тараса Шевченка

Споживачі продукції: фізика

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Науковий звіт "Спектральні прояви нанорозмірних структурних трансформацій в частково впорядкованих рідинах - рідких кристалах і спиртах"

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 45

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Безручко Інна Володимирівна

Голуб Павло Олександрович

Дорошенко Ірина Юріївна

Дорошенко Олена Петрівна

Жовтобрюх Юрій Михайлович

Чернолевська Єлизавета Анатоліївна

Керівник організації:

Григорук Валерій Іванович

Керівники роботи:

Погорелов Валерій Євгенійович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.