

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U003253

Державний реєстраційний номер: 0114U002996

Відкрита

Дата реєстрації: 22-01-2015



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Компетитивна дифузія газів в твердих пористих тілах

Початок етапу: 06-2014

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

## 2. Виконавець

Назва організації: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05408102

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: м. Тернопіль, вул. Руська, 56

Телефон: (0352) 524185

WWW: [www.tntu.edu.ua](http://www.tntu.edu.ua)

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

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: 380444813221

E-mail: [mon@mon.gov.ua](mailto:mon@mon.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: 2209080

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 35 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Компетитивна дифузія газів в твердих пористих тілах

### Назва роботи (англ)

Competitive diffusion of gases in porous solids

### Реферат (укр)

Проект орієнтований на експериментальні та теоретичні дослідження дифузії газів в неоднорідних нанопористих каталітичних середовищах, головним чином компетитивної (сумісної) дифузії двокомпонентної суміші газів в нанопористих цеоліт-каталізаторах з використанням методів параметричної ідентифікації багатоконпонентних систем. Необхідність досліджень випливає з лімітованості сучасних експериментальних методик і відповідних їм технічних засобів для дослідження процесів адсорбції з точки зору розгляду багатоваріантних ситуацій, що є необхідною умовою уточнення внутрішньої кінетики адсорбційних процесів. Застосування ефективних методів моделювання компетитивної дифузії дво- і більше компонент, методів розв'язання проблем знаходження розподілів коефіцієнтів дифузії вуглеводневих сполук в нано- і макропорах кристалітів з використанням експериментальних розподілів вуглеводневих сполук в каталітичних середовищах дає можливість розвинути отримані експериментальні NMR - зображення, як функції від часу, дослідити досягнення умов рівноваги при дії різних зовнішніх впливів. Ці результати дозволять отримати уточнену візію внутрішньої кінетики сумісних (компетитивних) дифузійних процесів, інформацію про повноту їх протікання в цеолітних каталізаторах та можливості практичного застосування.

### Реферат (англ)

The project focuses on experimental and theoretical studies of the diffusion of gases in nanoporous catalytic heterogeneous medium, mainly competitive diffusion of binary gas mixtures in nanoporous zeolite catalyst using the methods of parametric identification of multicomponent systems. The needs of research stems from limitations of modern experimental techniques and corresponding technical means to study adsorption processes in terms of consideration of multivariate situations, which is essential for clarifying the internal kinetics of adsorption processes. The use of effective methods for modelling competitive diffusion of two and more components, methods of solving the problems of diffusion coefficients the distribution in nano- and macropores crystallites using experimental distributions of hydrocarbon compounds makes it possible to develop the experimental NMR - image as a function of time to explore the achievement of equilibrium conditions by the action of various external influences. These results will provide a refined vision of the inner competitive kinetics diffusion processes, information on the completeness of their occurrence in zeolite catalysts and the possibility of practical application.

Індекс УДК: 519.711.3, 519.4

Коди тематичних рубрик НТІ: 28.17.19

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Методи параметричної ідентифікації кінетичних параметрів та математичне моделювання внутрішньої кінетики компетитивної дифузії вуглеводневої суміші газів з ароматичною та аліфатичною складовою в каталітичному нанопористому середовищі

**Назва продукції (англ):** Methods parametric identification of kinetic parameters and mathematical modeling of internal competitive diffusion kinetics hydrocarbon gas mixture of aromatic and aliphatic component of catalytic nanoparticles environment

**Очікувані результати:**

**Галузь застосування:** Хімічна та нафтогазова промисловості

**Опис продукції (укр):** Побудовано розв'язки прямих і спряжених задач параметричної ідентифікації кінетичних параметрів компетитивної дифузії газів в неоднорідних каталітичних нанопористих середовищ та розроблено алгоритми ідентифікації коефіцієнтів компетитивної дифузії для кожної з дифундованих компонент на основі результатів експериментальних досліджень (NMR-зображень) та аналітичних розв'язків математичної моделі (пряма і зворотня задача). Проведено числове моделювання та аналіз кінетичних параметрів процесу адсорбції вуглеводневих сумішей в мікро- та макропорах нанопористого середовища як функцій від часу і положення кристалітів ґрунтуючись на експериментальних даних NMR- досліджень. Виконано моделювання та оцінку концентраційних профілів, профілів концентраційних градієнтів для процесу компетитивної дифузії вуглеводневих сумішей в каталітичних середовищах з використанням запропонованих моделей та відновлених кінетичних параметрів

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:** 2015

**Виробник продукції:** Науково-дослідні установи

**Споживачі продукції:** Підприємства хімічної та нафто-хімічної промисловості

**Перспективні ринки:** український та закордонний ринки

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

Монографій - 1, статей - 8, тез доповідей - 4

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 53

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Михалик Дмитро Михайлович

Рогатинська Лілія Романівна

### Керівник організації:

Ясній Петро Володимирович

### Керівники роботи:

Петрик Михайло Романович (д. ф.-м. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.