Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0122U200282

Відкрита

Дата реєстрації: 16-06-2022

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

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

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 120.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2022	120.000

2. Замовник

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/ua

3. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05540014

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Телефон: 380322761978

Телефон: 380322761158

E-mail: icmp@icmp.lviv.ua

WWW: http://www.icmp.lviv.ua

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Теорія та комп’ютерне моделювання іонних матеріалів

Назва роботи (англ)

Theory and computer simulations of ionic materials

Мета роботи (укр)

Іонні матеріали включають широкий клас систем, зокрема, водні електроліти, розплавлені солі, іонні рідини кімнатної температури, заряджені колоїдні суспензії та білкові розчини. Всі ці речовини є важливими для сучасних технологій. Тому на порядку денному стоїть питання акуратного передбачення властивостей цих речовин як у чистому вигляді, так і у випадку сумішей та розчинів з їх участю. Даний проект ґрунтується на оригінальних ідеях, вже використаних та досліджених авторами цього проекту на прикладі неіонних матеріалів, де для термодинамічних властивостей були розвинуто теоретичні підходи, результати яких суттєво покращують узгодження з даними комп’ютерного експерименту. На попередньому етапі проєкту було розроблено спрощену нетривіальну модель іонної рідини. Метою заключного етапу проєкту є розрахунок вільної енергії Гельмгольца для модельних іонних систем та її використання для дослідження фазового співіснування, а також розрахунку рівноважних структурних та термодинамічних властивостей іонних матеріалів.

Мета роботи (англ)

Ionic materials include a wide class of systems, in particular, aqueous electrolytes, molten salts, ionic liquids at room temperature, charged colloidal suspensions and protein solutions. All these substances are important for modern technology. Therefore, the issue of accurate prediction of the properties of these substances both in pure form and in the case of mixtures and solutions with their participation is on the agenda. This project is based on original ideas already used and researched by the authors of this project in the case of nonionic materials, where theoretical approaches have been developed for thermodynamic properties, the results of which significantly improve the consistency with the data of a computer experiment. In the previous stage of the project, a simplified non-trivial model of ionic liquid was developed. The purpose of the final stage of the project is application of the developed theory to calculate the free Helmholtz energy for model ionic systems and its use for study of phase coexistence, as well as the calculation of equilibrium structural and thermodynamic properties of ionic materials.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: дослідження в галузі природничих наук

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	05.2022	12.2022	Остаточний звіт	Дослідження рівноважних властивостей модельних іонних систем із застосуванням вдосконаленої теорії середнього поля та комп'ютерного експерименту

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.17.41

Індекс УДК: 536.75

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Брик Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Керівники роботи:

Трохимчук Андрій Дмитрович (д. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Відповідальний за подання документів: Бзовська І.С. (Тел.: +38 (032) 276-77-86)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.