Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U114025

Відкрита

Дата реєстрації: 24-11-2021

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.): 165.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	165.000

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)

Кінцевою науковою метою проекту є розробка надійного теоретичного підходу для прогнозування термодинамічних властивостей та фазового співіснування в іонних матеріалів. Системи, які можна розглядати як іонні матеріали, включають водні електроліти, розплавлені солі, іонні рідини кімнатної температури, заряджені колоїдні суспензії та білкові розчини. Такі матеріали мають величезне науково-технічне значення. Проект ґрунтується на оригінальних ідеях, вже використаних та досліджених авторами цього проекту на прикладі неіонних матеріалів, де вони дали чудові результати. Але застосування до іонних матеріалів, ймовірно, представляє нові цікаві виклики. Точніше, ми прагнемо побудувати підхід теорії збурень, який вимагатиме лише обчислення поправки основного/базисного вкладу для вивчення та прогнозування термодинамічних властивостей іонних матеріалів. Крім того, проект включає розробку найпростішої нетривіальної моделі іонних рідин кімнатної температури, а також генерування нових даних комп'ютерного моделювання та нових розумінь щодо цього важливого класу нових матеріалів.

Мета роботи (англ)

The ultimate scientific goal of the project is to develop reliable theoretical approach for prediction of the equilibrium and phase coexistence properties of ionic materials. The systems, which can be considered as ionic materials include aqueous electrolytes, molten salts, room temperature ionic liquids, charged colloidal suspensions and protein solutions. Such materials are of immense scientific and technological importance. The project is based on original ideas already employed and examined by authors of this project for the non-ionic materials, where they yielded excellent results. But the application to ionic fluids is likely to present some interesting challenges. More precisely, we are aiming to construct a perturbation theory approach which only requires computation of a leading-order correction to study and predict thermodynamic properties of ionic materials. Besides, project includes development of the simplest nontrivial model for room-temperature ionic liquids as well as generation of new computer simulation data and new insights on this important class of new 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	11.2021	12.2021	Остаточний звіт	Теорія та комп’ютерне моделювання іонних матеріалів

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., с.н.с.)

Керівники роботи:

Трохимчук Андрій Дмитрович (д. ф.-м. н., с.н.с.)

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.