Секція: Хімія

ID:27252 15.09.2014 - 15:50 (66-1)

Назва пріоритетного напряму розвитку науки і техніки (згідно з Законом України від 12.10.2010 № 2519-17): Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності У-ни у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Назва пріоритетного тематичного напряму (згідно з постановою КМУ від 07.09.2011 № 942): Найважливіші проблеми хімії та розвитку хімічних технологій

Назва напряму секції (згідно з паспортом секції обирається до 2-х напрямів):
1-ий: 17. Комп'ютерне моделювання хімічних процесів. 17.2. Теоретичне моделювання властивостей сполук
2-ий: 3. Фізична та колоїдна хімія. 3.2. Хімічна термодинаміка

Організація-виконавець: ДВНЗ «Донецький національний технічний університет»

Адреса: вул. Артема, 58. Донецьк, 83000 Україна

Назва проекту: Аналіз термодинамічних та морфологічних параметрів плівок заміщених вуглеводнів на поверхні поділу фаз рідина/пара

АВТОРИ ПРОЕКТУ:

Керівник проекту (П.І.Б.): Висоцький Юрій Борисович
Науковий ступінь: д-р хім. наук **учене звання:** проф.
Місце основної роботи: ДВНЗ "Донецький національний технічний університет"
Посада: завідувач кафедри фізичної і органічної хімії
Робоч.тел., факс: (062) 305-35-67 дом. тел. (050) 178-50-16
E-mail: yuvysot@cable.netlux.org

Основні виконавці проекту (П.І.Б., науковий ступінь, учене звання, посада):
1. Матвієнко В. Г., к.х.н., доц., професор кафедри фізичної і органічної хімії
2. Карташинська О. С., к.х.н., доцент кафедри фізичної і органічної хімії
3. Васильєв О. О., аспірант кафедри фізичної і органічної хімії
4. Костенко Михайло Олександрович, студент Донецького національного технічного університету

Проект розглянуто й погоджено рішенням наукової (вченої) ради (ДВНЗ «Донецький національний технічний університет») від «12» вересня 2014р., протокол № 1

Керівник проекту:

_____ Ю.Б.Висоцький
підпис
" " _____ 2014 р.

Ректор
ДВНЗ «Донецький національний технічний університет»
_____ О.А. Мінаєв
підпис
" " _____ 2014 р.
МП

Секція 16. Хімія

П Р О Е К Т

фундаментального дослідження за рахунок видатків державного бюджету

Назва проекту: (не більше 15 слів) Аналіз термодинамічних та морфологічних параметрів плівок заміщених вуглеводнів на поверхні поділу фаз рідина/пара

Пропоновані строки виконання проекту (до 5 років на розсуд і за обґрунтуванням автора): 01 січня 2015 року по 31 грудня 2017 року

Оскільки робота складається з двох частин – розрахунково-теоретичної та експериментальної частини, це потребує істотних витрат часу. Зокрема, експериментальне дослідження рівноваг рідина/пара в трьохкомпонентних системах та побудова фазових діаграм вимагає щонайменш двох років. Розрахунково-теоретична частина складається з п'яти частин, на виконання кожної з яких потрібно півроку. Таким чином, на виконання усієї роботи та оприлюднення результатів треба три роки.

Обсяг фінансування: 450 тис. грн., зокрема за роками

на 1 рік: 140 тис. грн.

на 2 рік 150 тис. грн.

1. АНОТАЦІЯ (до 15 рядків)

(*короткий зміст проекту*)

Робота складається з двох напрямків та присвячена 1) дослідженню морфологічних і термодинамічних параметрів утворення моношарів поверхнево-активних речовин (ПАР) на поверхні розділу рідина/пара, а також 2) вивченню факторів, що впливають на розчинність компонентів природного газу в органічних розчинниках, та термодинамічних характеристик отримуваних розчинів. Вивчення структурних параметрів елементарних комірок моношарів ПАР, а також і термодинамічних характеристик їх кластеризації залежно від типу замісника вуглеводневого ланцюга, характеру між фазної поверхні та температури буде визначено шляхом напівемпіричних квантово-хімічних розрахунків. Дослідження факторів, що впливають на розчинність різних неорганічних компонентів від температури та тиску буде проведене із застосуванням експериментальних оригінальних методик, розроблених на кафедрі фізичної та органічної хімії ДонНТУ. Результати роботи сприятимуть подальшому розвитку таких напрямків науки і технології як: удосконалення розрахункових моделей, моделювання поверхні молекулярних мембран і процесів транспорту в них у рамках завдань теоретичної хімії, а також вдосконалення схем очищення природного та технологічних газів для промислових потреб.

2. ПРОБЛЕМАТИКА ДОСЛІДЖЕННЯ (до 30 рядків)

Об'єкт дослідження – плівки заміщених алканів нормальної будови на межі розділу фаз рідина/пара.

Предмет дослідження – залежності термодинамічних параметрів (ентальпія, ентропія та енергія Гіббса) утворення та кластеризації заміщених вуглеводнів на межі розділу фаз вода/повітря та вода/пара алканів від довжини їх вуглеводневого ланцюга, а також структурні параметри елементарних комірок моношарів ПАР.

Дослідження спрямовано на вирішення фундаментальної проблеми – яким чином фізичні та хімічні фактори впливають на термодинамічні та морфологічні параметри утворення моношарів заміщених алканів нормальної будови на різних межах розділу фаз рідина/газ.

В рамках поставленої фундаментальної проблеми відокремлені наступні конкретні задачі – визначити вплив температури, наявності двох функціональних груп у структурі ПАР та пари алканів у газовій фазі на термодинамічні та морфологічні параметри утворення моношарів неіоногенних ПАР на межі розділу фаз рідина/пара. Результати роботи, що будуть отримані, дозволять зробити внесок у теоретичні уявлення про механізм утворення нової двовимірної фази на поверхні розділу фаз вода/повітря, зокрема, для оптично активних ПАР. Результати проведених розрахунків дозволять визначити структурні параметри моношарів та їх залежність від розмірів гідрофільної частини молекул. На даний час також актуальним питанням є проблема поводження ПАР на рідких міжфазних поверхнях, зокрема поверхні поділу фаз вода/олія та вода/пара алканів. Ці системи цікаві для вивчення з точки зору біології, фізики мембран та поверхонь. Також дослідження даних систем важливо у харчовій промисловості під час визначення складу та властивостей компонентів, що утворюють емульсії. Крім того під час вивчення таких систем однією з важливих проблем є питання структури отриманих моношарів, чи встроюються молекули алканів в існуючий моношар, а також не визначено повністю термодинамічні характеристики цих процесів.

3. МЕТА І ОСНОВНІ ЗАВДАННЯ ПРОЕКТУ (до 30 рядків)

Метою дослідження є теоретичне та експериментальне визначення термодинамічних (ентальпія, ентропія та енергія Гіббса) і структурних (геометричні параметри елементарної комірки моношара) параметрів кластеризації заміщених вуглеводнів з нерозгалуженою будовою ланцюга на міжфазній поверхні рідина/пара, а також розчинності і термодинамічних характеристик компонентів природного газу в органічних абсорбентах. Для досягнення поставленої мети були визначені наступні задачі проекту:

- Розрахувати термодинамічні та структурні параметри кластеризації ПАР, що містять дифункціональні гідрофільні частини, на міжфазній поверхні вода/повітря із застосуванням напівемпіричного квантово-хімічного метода PM3;
- Розробити методику оцінки термодинамічних параметрів плівкоутворення дифункціональних ПАР в рамках суперпозиційно-адитивного підходу через відповідні параметри монофункціональних дифільних сполук;
- Вивчити залежність морфологічних характеристик 2D-доменів плівок різних класів ПАР від температури і на цій підставі визначити умови формування дендритних моношарів ПАР;
- Визначити умови утворення моношарів ПАР за наявності у газовій фазі парів алканів та вплив останніх на структуру отримуваних плівок;
- Розробити суперпозиційно-адитивну схему, що дозволяє безпосередньо враховувати та визначати вплив молекул водної фази на процес кластеризації ПАР;
- Впровадити суперпозиційно-адитивний підхід до визначення само- і взаємних поляризовності при описі фізико-хімічних характеристик вуглеводнів;
- Визначити вплив температури та тиску на розчинність компонентів природного газу в органічних розчинниках та їх термодинамічні характеристики.

4. СТАН ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОБЛЕМИ (до 30 рядків)

Дослідження мономолекулярних плівок ПАР є цікавим як з теоретичної, так і з практичної точок зору. Так, розробка моделей, що дозволяють оцінювати термодинамічні характеристики кластеризації ПАР на різних міжфазних поверхнях, дає можливість управляти процесом структуроутворення у моношарі під час росту плівки. На основі моношарів можливе утворення плівок Ленгмюра-Блоджет, які широко використовуються в електроніці та оптиці при отриманні тонкошарових покриттів із заданими оптичними властивостями, а також у біотехнології – при отриманні штучних біомембран та біосенсорів. Крім того, плівки ПАР широко використовуються для модифікування поверхонь штучно отриманих наноструктур металів з метою протикорозійного захисту та напівпровідникової пасивації.

Слід відмітити, що актуальним питанням є проблема поводження ПАР на рідких міжфазних поверхнях, зокрема поверхні поділу фаз вода/олія. Дослідження даних систем важливо у харчовій промисловості під час визначення складу та властивостей компонентів, що утворюють емульсії. Першим етапом вивчення поведінки ПАР на поверхні поділу фаз вода/олія можна виокремити аналіз процесу кластеризації ПАР на міжфазній поверхні вода/пара алканів, та вплив алканів парової фази на морфологічні характеристики отримуваних моношарів. На даний час термодинамічні та структурні характеристики таких моношарів ще не визначені повністю. Під час вирішення цієї задачі одними з найбільш інформативних моделей є моделі, що базуються на квантово-хімічних розрахунках, що були випробувані нами раніше на прикладі десяти класів монозаміщених вуглеводнів на міжфазній поверхні вода/повітря.

Ще одним цікавим напрямком досліджень, що проводиться на кафедрі фізичної і органічної хімії ДонНТУ, є вивчення рівноваг рідина/пара при підвищеному тиску. Застосовані при цьому методи належать до полумікрометодів та характеризуються високою інформаційністю. У рамках цих методик був одержаний детальний опис поведінки бінарних систем, що містять диоксид вуглецю та гліколі за умов високого тиску. Разом з тим є необхідність вивчення фазових рівноваг також і трикомпонентних систем (наприклад, диоксиду вуглецю у двокомпонентних розчинниках, що містять гліколіз та інші абсорбенти) за умов різних температур та тиску. Вирішення зазначених проблем зробить суттєвий внесок у розуміння особливостей фазових рівноваг флюїдних систем та вдосконалення технологій з переробки та очищення промислових газів.

5. МЕТОДИ, ПІДХОДИ, ІДЕЇ, РОБОЧІ ГІПОТЕЗИ ПРОЕКТУ (до 30 рядків)

Основна ідея проекту полягає у тому, що утворення моношарів ПАР на міжфазній поверхні рідина/пара відбувається за рахунок міжмолекулярних CH···HC-взаємодій між вуглеводневими ланцюгами дифільних молекул. При цьому, енергетичні внески CH···HC-взаємодій є однаковими та трансферабельними для різних класів ПАР. У той час як взаємодії між гідрофільними частинами ПАР носять дестабілізуючий характер та відрізняються для різних класів дифільних сполук. Така інтерпретація процесу кластеризації була реалізована нами у квантово-хімічній моделі, що дозволяє розрахувати значення термодинамічних характеристик утворення асоціатів неіоногенних ПАР різної розмірності аж до нескінченних моношарів. Отримані таким чином значення порогових довжин вуглеводневих ланцюгів для десяти класів неіоногеннних ПАР, за яких ці сполуки можуть утворювати моношари, добре узгоджуються із наявними експериментальними даними. Це зумовило виникнення наступної гіпотези: розроблений підхід може бути придатний для опису впливу різних чинників (температура, властивості рідкої та парової фази, а також структурні властивості самих дифільних сполук) на термодинамічні та морфологічні характеристики моношарів на поверхні розділу фаз рідина/пара. Тобто, запропонована модель окрім термодинамічних параметрів кластеризації може коректно відтворювати також і геометричні параметри елементарних комірок утворених моношарів, а також передбачити, за яких умов можливе проникнення молекул парової фази у моношар, що формується.

Впроваджені нами раніше експериментальні методики з вивчення фазових рівноваг двокомпонентних систем на прикладі діоксиду вуглецю та гліколей показали їх високу точність, відтворюваність, легкість у проведенні експерименту та малу витрату реактивів (декілька грамів для кожної системи). Це дозволило отримати великий масив експериментальних даних щодо рівноважних параметрів та термодинамічних характеристик компонентів у зазначених двокомпонентних системах. На основі отриманих даних були зроблені висновки щодо процесів розшарування в рідкій фазі вивчених систем та залежності концентраційних параметрів розшарування від температури. Тому ще однією гіпотезою проекту є те, що залежність концентраційних параметрів області розшарування від температури та тиску може бути вивчена з застосуванням запропонованих методик для багатокомпонентних систем (наприклад, гліколі-N-метилпіролідон-CO_2 та інші).

6. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ ВИКОНАННЯ ПРОЕКТУ ТА ЇХ НАУКОВА НОВИЗНА (до 40 рядків)

Результати виконання проекту дозволять зробити внесок у теоретичні уявлення про механізм утворення нової двовимірної фази на поверхні розділу фаз рідина/пара для дифільних сполук різної будови, вмісту функціональних груп та оптичної активності. Крім того, виконання поставлених задач зможе пролити світло на те, яким чином зовнішні фактори (температура, тиск, властивості рідкої та парової фази) впливають на морфологічні характеристики отримуваних моношарів. Зокрема, очікувані результати роботи дозволять вивести залежність довжини вуглеводневих ланцюгів молекул ПАР, здатних до формування конденсованих моношарів, від температури, а також вплив останньої на структуру отримуваних моношарів (дендритна або щільно організована). Крім того, систематизація результатів, отриманих для різних класів неіоногенних ПАР, що мають гідрофільну частину різного розміру, дозволить визначити закономірності структурних параметрів елементарних комірок моношарів даних сполук від розміру їх гідрофільних частин. Усі отримані результати розрахунків будуть порівняні та узгоджені із наявними експериментальними даними провідних вітчизняних та європейських авторів у даному напрямку, наприклад, групою д-ра Р. Міллера та проф. Д. Фольхарда з Інституту Макса Планка з колоїдів та поверхонь (Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Potsdam/Golm, Deutschland), а також проф. В. Б. Файнермана (Центральна науково-дослідна лабораторія, ДонНМУ ім. М. Горького, Донецьк).

Заплановано розрахувати термодинамічні параметри двомірних фазових переходів в адсорбційних моношарах різних класів ПАР на поверхні води за наявності пароподібних алканів у газовій фазі. А також визначити умови, за яких можливе проникнення пароподібних алканів у певні моношари, що формуються. Такі системи служитимуть перехідною ланкою до визначення поведінки ПАР на міжфазній поверхні вода/олія. Крім того, планується описати можливий шлях протікання кластеризації ПАР з різними довжинами вуглеводневих ланцюгів за різних температур. Важливим також є вдосконалення існуючої та розробка нової адитивної схеми, що дозволить безпосередньо враховувати вплив молекул рідкої фази на процес плівкоутворення. Слід також зазначити, що в рамках суперпозиційно-адитивного підходу планується розрахувати термодинамічні параметри утворення та кластеризації дифункціональних ПАР на основі відповідних даних для монофункціональних ПАР. Ці результати носитимуть прогностичний характер та дозволятимуть застосовувати названий підхід до оцінки необхідних параметрів дифункціональних ПАР без безпосереднього використання квантово-хімічних розрахунків, а лише на основі вже існуючих розрахункових або експериментальних даних для відповідних монофункціональних ПАР.

Результати проекту, що стосуються визначення термодинамічних характеристик фазових рівноваг рідких систем, також необхідні для розрахунків технологічних схем очистки природного і технологічних газів від діоксиду вуглецю, сірководню та ін., розвитку теорії розчинів, поповнення банку даних про фазові рівноваги при підвищеному тиску.

Задачі, що поставлені у рамках даного проекту, є актуальними у світовій та вітчизняній літературі. Але систематичні та всеосяжні дані з цих питань відсутні у рамках застосовуваних тут методів досліджень.

7. ФІНАНСОВЕ ОБГРУНТУВАННЯ ВИТРАТ ДЛЯ ВИКОНАННЯ ПРОЕКТУ

Детальна інформація щодо калькуляції кошторисної вартості проекту міститься у додатку.

7.1. Обсяг витрат на оплату праці становить 236237,74 грн., з яких на 1 рік – 71436,81 грн., на 2 рік – 77207,16 грн., на 3 рік – 87593,77 грн.

7.2. Обсяг витрат на матеріали становить 10600 грн., з яких на 1 рік – 200 грн., на 2 рік – 10200 грн., на 3 рік – 200 грн.

7.3. Витрати на відрядження безпосередніх виконавців проекту становлять 30000 грн., з яких на 1 рік – 16000 грн., на 2 рік – 6000 грн., на 3 рік – 8000 грн.

7.4. Непрямі витрати та витрати на нарахування зарплатні становлять 173162,26 грн. за увесь період тривалості проекту.

7.5. Собівартість проекту дорівнює 450000 грн.

8. ДОРОБОК АВТОРІВ ЗА ТЕМАТИКОЮ ПРОЕКТУ (за останні 5 років)

8.1. Публікації за тематикою проекту *(обов'язково надати посилання на електронні версії монографій, статей у фахових виданнях України та журналах, що входять до наукометричних баз даних)*

Наукові видання:

8.1.1. Перелік статей у журналах та збірниках наукових праць, що входять до наукометричних баз даних (Scopus, Web of Science) (не більше 12 статей).

1. Vysotsky Yu. B. Thermodynamics of the Clusterization Process of Cis Isomers of Unsaturated Fatty Acids at the Air/Water Interface / Yu. B. Vysotsky, E. A. Belyaeva, V. B. Fainerman, E.V. Aksenenko, D. Vollhardt, R. Miller // J. Phys. Chem. B. – 2009. - Vol. 113. – P. 4347 – 4359. **DOI:** 10.1021/jp808834a
2. Vysotsky Yu. B. Quantum-chemical analysis of thermodynamics of two-dimensional cluster formation of α-amino acids at the air/water interface / Yu. B. Vysotsky, E.S. Fomina, E. A. Belyaeva, V. B. Fainerman, E.V. Aksenenko, D. Vollhardt, R. Miller // J. Phys. Chem. B. – 2009. - V. 113. – P. 16557 – 16567. D**OI:** 10.1021/jp907751z
3. Yu. B. Vysotsky Quantum-Chemical Description of the Thermodynamic Characteristics of Clusterization of Melamine-type Amphiphiles at the Air/Water Interface. / Yu. B. Vysotsky, A. A. Shved, E. A. Belyaeva, E. V. Aksenenko, V. B. Fainerman, D. Vollhardt, R. Miller. // J. Phys. Chem. B. – 2009. – Vol. 113 (40). – P. 13235–13248. **DOI:** 10.1021/jp904598k
4. Yu. B. Vysotsky. Quantum-Chemical Analysis of Thermodynamics of Two-Dimensional Cluster Formation of Racemic α-Amino Acids at the Air/Water Interface / Yu. B. Vysotsky, E.S. Fomina, E. A. Belyaeva, V.B. Fainerman, E.V. Aksenenko, D. Vollhardt, R. Miller. // J. Phys. Chem. B. – 2011. – Vol. 115. - P. 2264–228. **DOI:** 10.1021/jp110730b
5. Yu. B. Vysotsky. Thermodynamics of the Clusterization Process of trans-Isomers of Unsaturated Fatty Acids at the Air/Water Interface / Yu. B. Vysotsky, E. A. Belyaeva, E. S. Fomina, D. Vollhardt, V. B. Fainerman, R. Miller // J. Phys. Chem. B. – 2012. – Vol. 116. - P. 2173–2282. **DOI:** 10.1021/jp211913p
6. Yu. B. Vysotsky. Temperature Effect on the Monolayer Formation of Substituted Alkanes at the Air/Water Interface: A Quantum Chemical Approach. / Yu. B. Vysotsky, E.S. Fomina, E. A. Belyaeva, V.B. Fainerman, D. Vollhardt, R. Miller // J. Phys. Chem. B. – 2012. – Vol. 116. - P. 8996–9006. **DOI:** 10.1021/jp303617n
7. Yu. B. Vysotsky. Superposition-additive approach: Thermodynamic parameters of monosubstituted alkanes. / Yu.B. Vysotsky, E.A. Belyaeva, A.O. Vasylyev, V.B. Fainerman, E.V. Aksenenko, D. Vollhardt, R. Miller // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2012. - Vol. 413 - P. 303-306. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2012.03.046
8. Yu.B. Vysotsky. A simple method for estimation of the 2D cluster formation temperature of substituted alkanes at the air/water interface. / Yu.B. Vysotsky, E.S. Fomina, E.A. Belyaeva, D. Vollhardt, V.B. Fainerman, R. Miller // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2012. – Vol. 413 – P. 288-291. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2012.03.047
9. Yu. B. Vysotsky. Superposition-Additive Approach: Clusterization Thermodynamic Parameters of Bifunctional Nonionic Amphiphiles at the Air/Water Interface. / Yu. B. Vysotsky, E. S. Fomina, E. A. Belyaeva, D. Vollhardt, V. B. Fainerman, R. Miller.// J. Phys. Chem. C. – 2013. – Vol. 117 (31). – P.16065–16075. **DOI:** 10.1021/jp404999u
10. Yu. B. Vysotsky. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of Aliphatic Amides at the Air/Water Interface / Yu. B. Vysotsky, E. S. Fomina, E.A. Belyaeva, V. B. Fainerman, D. Vollhardt. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2013. – Vol. 15. – P. 2159-2176. **DOI:** 10.1021/jp308479x

11. E. S. Fomina. On Hexagonal Orientation of Fatty Alcohols in Monolayers at the Air/Water Interface: Quantum-Chemical Approach / E. S. Fomina, Yu. B. Vysotsky, E. A. Belyaeva, D. Vollhardt, V. B. Fainerman,R. Miller // J. Phys. Chem. C, 2014, 118, 4122 − 4130. **DOI:** 10.1021/jp409911a
12. Yu. B. Vysotsky. The quantum-chemical approach to calculations of thermodynamic and structural parameters of formation of fatty acid monolayers with hexagonal packing at the air/water interface / Yu. B. Vysotsky, E. A. Belyaeva, E. S. Fomina, D. Vollhardt, V. B. Fainerman, R. Miller // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P. 3187-3199. **DOI:** 10.1039/C3CP54124J

8.1.2. Перелік статей у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України (не більше 12 статей).

1. Е.С. Фомина. Квантово-химический анализ термодинамики олигомеризации N-ацилпроизводных аланина на поверхности раздела фаз вода/воздух / Е.С. Фомина, Ю. Б. Высоцкий // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2014, вип. 2 (23), с.19-31. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2014_2_3.pdf
2. Е. А. Беляева. Моделирование структурных и расчет термодинамических параметров фрагментов гексагонального монослоя насыщенных карбоновых кислот / Е. А. Беляева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2014. - Вип. 2 (23). – С.31-41. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2014_2_4.pdf
3. Беляева Е.А. Квантово-химический расчет структурных и термодинамических параметров кластеризации насыщенных карбоновых кислот на межфазной поверхности вода/воздух / Беляева Е.А. // Вестник Новгородского государственного университета им. Ярослава Мудрого. Серия: Физико-математические науки. 2013. – Вип. 73. - Том 2. С. 7-13. http://www.novsu.ru/vestnik/vestnik/i.78099/?article=1082802
4. E.S. Fomina. On the calculation of the tilt angle of substituted alkanes with respect to the air/water interface in framework of PM3 approximation / E.S. Fomina // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2013. - Вип. 1 (20). – С.36-43. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2013_1_5.pdf
5. Е.С. Фомина. Оценка термодинамических параметров образования и димеризации α-гидрокси-кислот в рамках суперпозиционно-аддитивного подхода / Е.С. Фомина // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2013. - Вип. 2 (21). – С.28-40. http://www.irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?Z21ID=&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&S21STN=1&S21REF=10&S21FMT=juu_all&C21COM=S&S21CNR=20&S21P01=0&S21P02=0&S21P03=PREF=&S21COLORTERMS=0&S21STR=Npdntu_chem
6. Е.С. Фомина. Квантово-химический анализ термодинамики димеризации алифатических амидов на поверхности раздела фаз вода/воздух / Е.С. Фомина, Е. А. Беляева, Я.Ю. Смирнов, Ю.Б. Высоцкий // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2012. - Вип. 199 (19). – С.18-31. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2012_19_4.pdf
7. Е.С. Фомина. Квантово-химическая оценка температуры начала 2D-кластеризации замещенных алканов на поверхности раздела фаз вода/воздух / Е.С. Фомина, Е. А. Беляева, Ю.Б. Высоцкий // Вісник Харківського національного університету. № 1026. Хімія. 2012. - Вип. 21 (44). - С. 80-97. http://chembull.univer.kharkov.ua/archiv/2012/05.pdf
8. Завадский Я.В. Квантово-химический анализ термодинамических параметров димеризации метиловых эфиров карбоновых кислот на поверхности раздела фаз вода/воздух / Завадский Я.В., Беляева Е.А., Высоцкий Ю.Б.Квантово // Наукові праці Донець-кого національного технічного університе-ту. Серія: хімія і хімічна технологія. 2012. - Вип. 18 (198) – С. 47-55. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2012_18_8.pdf

9. E. S. Fomina. Quantum chemical analysis of thermodynamic parameters of α-hydroxy acid dimerization at the air/water interface. / E. S. Fomina // Chemistry, physics and technology of surface. 2012. – Vol. 3 (4). – P. 405-418. http://cpts.com.ua/images/stories/pdf/3/3.4/fomina.pdf
10. Е.С.Фомина. Применение суперпозиционно-аддитивного подхода к описанию термодинамических параметров образования α-аминокислот / Е.С.Фомина, Е.А.Беляева, Ю.Б. Высоцкий.// Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2011. - Вип. 184 (16). – С. 50-59. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2011_16_9.pdf
11. Е.А.Беляева. Термодинамические параметры димеризации транс-моноеновых карбоновых кислот на межфазовой поверхности вода/воздух / Е.А.Беляева, Е.С.Фомина, Ю.Б. Высоцкий // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2011. – Вип. 187 (17). – С. 21-28. http://nbuv.gov.ua/j-pdf/**Npdntu_chem**_2011_17_5.pdf
12. Е.А.Беляева. Суперпозиционно-аддитивный поход в описании термодинамических параметров димеризации замещенных алканов на межфазной поверхности вода/воздух / Е.А.Беляева, Ю.Б.Высоцкий // Наукові праці Донець-кого національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2010. - Вип. 162 (14). – С. 12-20. http://www.irbis-nbuv.gov.ua/cgi-bin/irbis_nbuv/cgiirbis_64.exe?Z21ID=&I21DBN=UJRN&P21DBN=UJRN&S21STN=1&S21REF=10&S21FMT=juu_all&C21COM=S&S21CNR=20&S21P01=0&S21P02=0&S21P03=PREF=&S21COLORTERMS=0&S21STR=Npdntu_chem

8.1.3. Перелік монографій (розділи в монографіях), опублікованих у провідних закордонних наукових видавництвах.

1. From molecules to functional architecture. Supramolecular interactions / Edited by Volodymyr I. Rybachenko. – Donetsk [East Publisher House], 2012. – 103-127. http://www.supra.amu.edu.pl/files/monographs/from_molecules_to_functional_architecture_-_supramolecular_interactions.pdf
2. New trends in supramolecular chemistry / Edited by Volodymyr I. Rybachenko, Donetsk «East Publisher House», 2014, 217-251.

8.1.4. Перелік монографій, що опубліковані за рішенням наукової (вченої) ради вищого навчального закладу/наукової установи.

1. Эффекты заместителей в химической термодинамике. Квантово-химический подход : монография / М-во образования и науки Украины, Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского; Ю. Б. Высоцкий, А. О. Васильев, Е. А. Беляева, Э. Г. Эйлазян. – Донецк: [ДонНУЭТ], 2009.- 196 с. http://ea.donntu.edu.ua/handle/123456789/16011
2. Квантово-химический анализ кластеризации дифильных соединений на межфазной поверхности вода/воздух / М-во образования и науки Украины, Донецкий национальный технический университет; Ю. Б. Высоцкий, Е. А. Беляева, Е.С. Фомина. – Донецк:[ДонНТУ], 2014.- 276 с. http://ea.donntu.edu.ua/handle/123456789/24828

8.2. Підготовка наукових кадрів

8.2.1. Перелік захищених авторами проекту кандидатських дисертацій за тематикою проекту.

1. Фоміна О. С. «Квантово-хімічний аналіз кластеризації α-амінокислот на поверхні розділу фаз вода/повітря, захист відбувся 17 березня 2011 року на засіданні спеціалізованої

вченої ради Д 11.216.01 в Інституті фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України (науковий керівник проф. Висоцький Ю.Б.);

8.2.2 Перелік захищених під керівництвом авторів проекту (науковий керівник) кандидатських дисертацій за тематикою проекту.

1 Ніфантова Л. С. «Рівновага рідина-пара в системах, що містять діоксид вуглецю та органічні абсорбенти», захист відбувся 17 березня 2011 року на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 11.216.01 в Інституті фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України (науковий керівник проф. Матвієнко В.Г.)

8.3. Охоронні документи на об'єкти права інтелектуальної власності створені за тематикою проекту.

немає

8.4. Участь авторів в проектах міжнародного науково-технічного співробітництва за тематикою досліджень за останні 5 років (обов'язково вказати назву програми і проекту, виконавців та терміни виконання)

8.4.1. Перелік наукових проектів (грантів), що завершені.

немає

8.4.2. Перелік наукових проектів (грантів), що продовжуються.

Договір про співробітництво між ДонНТУ та Інститутом Макса Планка з колоїдів та поверхні (Гольм/Потсдам, Германия) з питань освіти та досліджень.

8.5. Членство в редколегії наукових журналів

8.5.1. Членство в редколегії журналів, що включені до переліку наукових фахових видань України

Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія.

Таблиця 1.

Доробок авторів проекту за останні 5 років

№ з/п	Показники	Кількість
1.	**Публікації авторів за тематикою проекту*:**	
	1.1. Наукові видання:	26
	1.1.1. Статті у журналах та збірниках наукових праць, що входять до наукометричних баз даних (Scopus, Web of Science).	10
	1.1.2. Статті у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України.	12
	1.1.3. Монографії (розділи в монографіях), опубліковані у провідних закордонних наукових видавництвах.	2
	1.1.4. Монографії, що опубліковані за рішенням наукової (вченої) ради вищого навчального закладу/наукової установи.	2
	1.2. Навчально-методичні видання:	
	1.1.1. Підручники, навчальні посібники.	0

	1.1.2. Інші видання (словники, довідники тощо).	0
2.	**Підготовка наукових кадрів:** 1.1. Захищено авторами проекту докторських дисертацій за тематикою проекту. 1.2. Захищено під керівництвом авторів проекту (науковий консультант) докторських дисертацій за тематикою проекту. 1.3. Захищено авторами проекту кандидатських дисертацій за тематикою проекту. 1.4. Захищено під керівництвом авторів проекту (науковий керівник) кандидатських дисертацій за тематикою проекту.	 0 0 2 2
3.	**Охоронні документи на об'єкти права інтелектуальної власності створені за тематикою проекту:** 3.1. Отримано патентів (свідоцтв про право автора на твір) України. 3.2. Отримано патентів (свідоцтв про право автора на твір) інших держав. 3.3. Продано ліцензій	 0 0
4.	**Членство в редколегії наукових журналів:** 4.1. Членство в редколегії журналів, що входять до наукометричних баз даних (Scopus, Web of Science). 4.2. Членство в редколегії журналів, що включені до переліку наукових фахових видань України.	 0 1

* - Вказується повна кількість робіт за останні 5 років

9. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Результати, що будуть отримані під час виконання проекту, дозволять зробити внесок у теоретичні уявлення про механізм утворення нової двовимірної фази на різних поверхнях розділу фаз для дифункціональних та оптично активних ПАР за умов різних температур. Результати проекту дозволять визначити структурні параметри елементарних комірок моношарів неіоногенних ПАР, та морфологічні особливості утворюваних ними 2D-доменів на поверхні розділу фаз вода/повітря та вода/пара алканів. Крім того, дослідження залежностей термодинамічних параметрів кластеризації ПАР, що містять пептидний зв'язок CO–HN, є корисним, оскільки такі дифільні сполуки є цікавими для моделювання біомембран та процесів, що виникають на їх поверхні. Крім того, одержані рівноважні параметри поповнять банки термодинамічних даних, а розроблені методики будуть використані для подальшого вивчення фазових рівноваг. Результати роботи також корисні для розробки та удосконалення схем очищення промислових газів, а також в хімічній, фармацевтичній, нафтохімічній, парфумерній та харчовій промисловості.

Планується видання щонайменш восьми статей в журналах міжнародного рівня і в журналах за списком ДАК України, а також доповісти результати роботи на конференціях міжнародного рівня. Планується участь у виданні колективної монографії з робочою назвою «From molecules to functional architecture. Supramolecular interactions».

Результати роботи будуть використані для вдосконалення та оновлення наступних лекційних курсів: «Нанотехнологіїї» для магістрів та «Поверхневі явища та колоїдні системи» для студентів другого курсу. Також планується виконання магістерської кваліфікаційної роботи.

За результатами даного дослідження планується захист дисертаційної роботи аспіранта кафедри ФОХ Васильєва О.О. «Суперпозиційно-адитивний підхід та само- і взаємні поляризовності при описі фізико-хімічних характеристик вуглеводнів» (захист має відбутися взимку-навесні 2016 року) та докторської дисертації проф. кафедри ФОХ, к.х.н. Матвієнка В.Г.

за наступною темою «Фазові рівноваги в системах, що містять компоненти природного газу та органічні абсорбенти» (захист має відбутися взимку 2016 року). Патенти не плануються.

Таблиця 2.

№ з/п	Показники	Кількість
1.	**Заплановані публікації авторів за тематикою проекту:**	
	1.1 Статті у журналах та збірниках наукових праць, що входять до наукометричних баз даних (Scopus, Web of Science).	8
	1.2 Статті у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України.	8
	1.3 Монографії (розділи в монографіях), опубліковані у провідних закордонних наукових видавництвах.	1
	1.4 Монографії, що опубліковані за рішенням наукової (вченої) ради вищого навчального закладу/наукової установи.	1
2.	**Використання результатів роботи в навчальному процесі:**	
	2.1. Публікація підручників, навчальних посібників.	0
	2.2. Публікація інших видань (словники, довідники тощо).	0
	2.3. Розроблення і впровадження нового лекційного курсу або циклу лабораторних робіт.	0
	2.4. Часткове використання в лекційних курсах або лабораторних практикумах.	2
3.	**Заплановане використання результатів проекту при підготовці наукових кадрів:**	
	3.1. Захист докторських дисертацій (прийняття до захисту спеціалізованою вченою радою) за тематикою проекту.	1
	3.2. Захист кандидатських дисертацій (прийняття до захисту спеціалізованою вченою радою) за тематикою проекту.	1
	3.3. Захист магістерських робіт за тематикою проекту	1
4.	**Отримання охоронних документів на об'єкти права інтелектуальної власності створені за тематикою проекту:**	
	4.1. Буде отримано патентів (свідоцтв про право автора на твір) України.	0
	4.2. Буде отримано патентів (свідоцтв про право автора на твір) інших держав.	0
5.	**Участь у виконанні проекту:**	
	5.1. Студентів.	1
	5.2. Аспірантів, молодих вчених.	2

10. ЕТАПИ РОБОТИ

Етапи роботи	Назва та зміст етапу	**Очікувані результати етапу** (зазначити конкретні наукові результати за етап), **звітна документація** (зазначити кількість запланованих публікацій, захистів магістерських, кандидатських та докторських дисертацій, отримання охоронних документів на об'єкти права інтелектуальної власності).
1 етап (2015 р.)	1. Експериментальне визначення меж розчинності в трикомпонентних системах, що	Термодинамічні характеристики компонентів та фазові діаграми рівноваги рідина - рідина для трикомпонентних систем.

	містять леткий та нелеткі компоненти, при температурах 0 – 50^0C та тисках до 9 МПа. Побудова фазових діаграм. 2. Проведення квантово-хімічних розрахунків термодинамічних параметрів кластеризації α-гідроксикарбонових кислот та метилових ефірів карбонових кислот.	Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 3. Термодинамічні характеристики кластеризації досліджуваних систем. Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 3, публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних – 2.
2 етап (2016 р.)	3. Моделювання елементарних комірок кристалічних моношарів, та визначення структурних параметрів плівок неіоногенних ПАР. 4. Експериментальне дослідження рівноваг рідина/пара в трьохкомпонентних системах, що містять леткий та нелеткі компоненти. Визначення термодинамічних характеристик компонентів в цих системах. Побудова фазових діаграм. 5. Дослідження впливу температури на морфологічні особливості доменів заміщених алканів на міжфазній поверхні вода/повітря у рамках квантово-хімічного підходу.	Модельні структури елементарних комірок ПАР, їх геометричні характеристики. Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 2, публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних – 1. Термодинамічні характеристики компонентів та розчинів. Фазові діаграми рівноваги рідина/пара для трикомпонентних систем. Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 3. Температурні залежності термодинамічних параметрів кластеризації ПАР, та класифікація їх доменів за морфологічними характеристиками Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 2, публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних – 1.
3 етап (2017 р.)	6. Визначення факторів (довжина вуглеводневого ланцюга алканів та ПАР), що впливають на проникнення алканів з парової фази у моношари різних класів ПАР, що утворюються на міжфазній поверхні вода/пара; 7. Визначення особливостей перебігу шароутворення пароподібних алканів у присутності поверхнево-активних речовин на водній поверхні.	Залежності енергетичних параметрів моношарів ПАР з різною довжиною ланцюга від за умов проникнення у їх плівки алканів Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 3, публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних – 1. Залежності термодинамічних параметрів кластеризації пароподібних алканів за наявності малих кількостей ПАР у водній фазі. Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних та фахових видань України – 2, публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних – 1.

11. КЕРІВНИК ТА ВИКОНАВЦІ ПРОЕКТУ (з оплатою в межах запиту)

Доктори наук __(1)___ , кандидати наук ____(2)____ ,
Молоді вчені до 35 років __(2)__, з них кандидатів __(1)__, докторів __(0)__
Наукові працівники без ступеня __(1)__
Інженерно-технічні кадри: __(0)__, допоміжний персонал -__(0)__,
студенти_(1)_.
РАЗОМ:___5___

Таблиця 4.

Виконавці проекту*

№ з/п	Прізвище, ім'я, по батькові	Науковий ступінь	Вчене звання	Посада і місце основної роботи	Вік
1	Висоцький Ю. Б.	д.х.н.	проф.	завідувач кафедри фізичної і органічної хімії	70
2	Матвієнко В. Г.	к.х.н.	доц.	професор кафедри фізичної і органічної хімії	69
3	Карташинська О. С.	к.х.н.	-	доцент кафедри фізичної і органічної хімії	30
4	Васильєв О. О.	-	-	аспірант кафедри фізичної і органічної хімії	35
5	Костенко М. О.	-	-	студент ДонНТУ	21

*вносяться дані про докторів та кандидатів наук, а також молодих вчених та наукових працівників без ступеня

12. МАТЕРІАЛЬНО-ТЕХНІЧНА БАЗА ДЛЯ ВИКОНАННЯ ПРОЕКТУ І ЇЇ УДОСКОНАЛЕННЯ

12.1. Назва і коротка характеристика наукового (науково-навчального підрозділу), на базі якого виконуватиметься дослідження.

Донецький національний технічний університет, факультет екології та хімічної технології, кафедра фізичної та органічної хімії.

12.2. Перелік наявного обладнання, термін його сертифікації та метрологічної повірки (за потреби).

Теоретичні квантово-хімічні розрахунки проводяться за допомогою персонального комп'ютера (інвентарний номер 2597) в рамках квантово-хімічного програмного комплексу Морас2000.