

ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор Інституту біоколоїдної хімії
ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України
д.т.н. В.А. Прокопенко



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
Електрокінетичні явища в природних нано/мікро-флюїдних та дисперсних системах:
характеризація, обробка, моделювання
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: “Підтримка досліджень провідних та молодих учених”
Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0138

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проєкту) 2020.02/0138 Електрокінетичні явища в природних нано/мікро-флюїдних та дисперсних системах: характеристика, обробка, моделювання

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу “Підтримка досліджень провідних та молодих учених” (назва конкурсу) протокол від « 16-17 » вересня 2020 року № 21

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту
Початок – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;
Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн. 8000000 (вісім мільйонів)

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 1400000 (один мільйон чотириста тисяч)
2-й рік 3400000 (три мільйони чотириста тисяч)
3-й рік 3200000 (три мільйони двісті тисяч)

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 9 виконавців, з них:

доктори наук 1;
кандидати наук 7;
інші працівники 1.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Грантоотримувач - Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка НАН України; адреса: 03142, м. Київ, бул. Академіка Вернадського, 42; код ЄДРПОУ 05402714. Субвиконавців - немає.

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

визначення особливостей електроосмосу у ґрунтах, глинах та пісках; вивчення механізмів та побудова математичних моделей впливу електроосмосу на масообмін в цих системах; вивчення ролі цих механізмів при електрокінетичній ремедіації та біоремедіації ґрунтів.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Поглиблений аналіз процесів, що відбуваються у природних дисперсних системах з точки зору поведінки мікро/нанофлюїдних систем. Вивчення ролі ефекту електрокінетичної дисперсії у інтенсифікації транспорту розчиненої речовини, зокрема: вимірювання електроосмосу та електрокінетично інтенсифікованого масопереносу у зразках природних та штучних ґрунтів та різномасштабне моделювання.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

У середині 20 століття було запропоновано два напрямки використання електроосмосу: електрохроматографія та електрокінетична обробка ґрунтів. Враховуючи подібність цих двох напрямків, отримані раніше результати для мікро/нанофлюїдних систем можна використовувати для пояснення та описання поведінки, що спостерігається під час електрокінетичної обробки ґрунтів.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Оригінальність проєкту визначається оригінальністю наступних досліджень, які не проводились раніше, або були проведені неповно: ефект електрокінетичної дисперсії буде систематично вивчатися для зразків ґрунтів, глин та пісків, буде вивчена роль ЕД у видаленні забруднень, буде визначено, як ЕД впливає на метаболізуючу активність та життєздатність мікроорганізмів у забруднених ґрунтах.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Запропонована методологія передбачає три види дослідницької діяльності: експериментальну, теоретичну та комп'ютерне моделювання (чисельний експеримент). Експериментальна частина проєкту стосуватиметься добре адресованих модельних систем для різних типів ґрунтів, забруднених важкими металами або іншими забруднювачами.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Робота виконана в повній відповідності з запланованими завданнями. Отримано наступні найважливіші результати наукових досліджень:

Відібрано, охарактеризовано та підготовлено для подальших експериментальних досліджень 14 зразків природних ґрунтів – еталонних та забруднених важкими металами. Підібрано адекватні методики для дослідження органічних і неорганічних поллютантів природних ґрунтів. Показано, що більша частина важких металів (As, Co, Cr, Cu, Ni, Pb, Zn) в зразках забруднених ґрунтів перебувають у біодоступних формах. У найбільш токсичній формі знаходяться Zn (62-87%), Ni (66-71%), Cu (73-82%), Pb (40-80%). Синтезовано просторово-зшиті високодисперсні співполімерні гідрогелі з розгалуженою системою пор на основі мономерів різної хімічної природи, зокрема, гідрофільних (насамперед, акриламід), гідрофобних (акрилонітрилу) та іоногенних (акрилової кислоти). Полімерні матеріали отримано у вигляді гранул розміром від 0,05 мм до 2,5 мм, який є оптимальним для формування різних ґрунтових фракцій, відповідно до поставлених завдань. Синтезовано мікробний субстрат, який характеризується наявністю наступних систематичних груп мікроорганізмів: бактерії амоніфікатори органічного азоту, бактерії, які засвоюють мінеральні форми азоту, актиноміцети, мікроскопічні гриби. Синтезовано та охарактеризовано частинки наномагнетиту та гібридні частинки лапоніт+наномагнетит для модельних систем. Розмір гібридних частинок складає ≈ 24

нм. Дано детальний літературний огляд існуючих літературних джерел по проблемі експериментального дослідження гібридних анізотричних намагнічених нанопластинок Лапоніту. Підготовлено главу про біомедичне застосування анізотричних наночастинок Лапоніту до колективної монографії. Зроблено літературний огляд всесвітньої проблеми контамінованих ґрунтів.

Розроблено математичну модель та проведено розрахунки часової еволюції смуги незарядженого компоненту розчину в умовах електроосмотичної дисперсії в тонких капілярах. Проаналізовано основні параметри, що характеризують розповсюдження компоненту розчину в умовах електроосмотичної дисперсії у перехідні часи перед встановленням асимптотичного режиму. Запропонована схема знаходження швидкості електрофорезу (електроосмосу) для розбавленої суспензії (упаковки) гідрофобних частинок різноманітних форм з довільними ізотермами адсорбції іонів для розчину довільної суміші сильних електролітів. Запроваджено параметр з розмірністю довжини, який є критерієм гідрофобності поверхні для електрокінетики. Запропонована двомасштабна модель для описання динаміки електрофоретичного пакування частинок на субстраті. Проведений критичний огляд літератури, присвяченої гідродинаміці та електрокінетиці течій у присутності гідрофобних поверхонь. За результатами досліджень готуються дві публікації у журналах першого та другого кuartилів.

Розроблено та виконано тестування ряду обчислювальних алгоритмів та програм для побудови та аналізу упаковок видовжених частинок для випадків 1D та 2D геометрії. Проведено розрахунки кінетики формування пакувань та досліджено вплив заданого параметру впорядкування на стан насичення. Проведено аналіз зв'язності частинок в упаковках у припущенні того, що частинки мають структуру ядра-оболонки. Показано, що значення співвідношення сторін та параметра впорядкування частинок суттєво впливають на структуру упаковок, формування далекосяжного зв'язку та поведінку електропровідності. Для орієнтованих упаковок спостерігались різні анізотропії власної електропровідності та поведінки електропровідності. По результатам теоретичних досліджень підготовлено статтю для публікації у журналі Physical Review E та підготовлено стендову доповідь для міжнародної он-лайн конференції Conference of the Complex Systems (CCS 2020), 4-10 грудня.

Всі отримані результати будуть застосовані у подальших дослідженнях в рамках Проєкту та представлені у наукових публікаціях за результатами досліджень.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Науково-технічна продукція в рамках Проєкту не розроблялася.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Проєкт має фундаментальну спрямованість. Проте, його очікувані результати будуть мати очевидну перспективу використання у різних екологічно сприятливих технологіях обробки ґрунтів, глин, пісків та ін.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Безпосередні кроки у використанні результатів проєкту пов'язані з очікуваним резонансом від престижних публікацій у виданнях першого і другого кuartилей, які будуть підготовлені. Це має допомогти знайти послідовників у світі для організації міжнародного співробітництва в цій науковій галузі та отримання міжнародної фінансової підтримки для розширення цих досліджень.

Міждисциплінарний характер дослідження дозволяє сподіватися, що реалізація проєкту буде мати помітний вплив на різні наукові галузі: колоїдну хімію, аналітичну та біоаналітичну хімію, агрономічну науку, екологічні дослідження та ін. Відповідно, ми сподіваємось на утворення міжнародного міждисциплінарного консорціуму, зосередженого на темі проєкту.

Очікується, що результати можуть бути використані у технологічних дослідженнях, що мають справу з інтенсифікацією масообміну у ґрунтах, глинах, пісках та ін. Електрокінетичні ремедіація та біо-ремедіація ґрунтів виглядають найближчими галузями для реалізації результатів проекту.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проекту

Зав. відділу, д.ф.-м.н.

(посада)

В.І. Ковальчук

ПІБ

(підпис)

