

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U006819

Державний реєстраційний номер: 0111U000113

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження умов хімічної взаємодії в упорядкованих середовищах

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0562)47-33-97, (0562)47-33-16

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 78

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізико-хімічні основи створення наноматеріалів з фазовим переходом напівпровідник-метал для фотонних кристалів

Назва роботи англійською:

Bases of creation of nanomaterials with phase transition physical and chemical semiconductor-metal for photonic crystals

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - наноматеріали для фотонних кристалів. Мета роботи - визначення умов хімічної взаємодії утворення нанодисперсних упорядкованих структур та їх властивостей шляхом комп'ютерного моделювання. Методи дослідження - комп'ютерне моделювання. Встановлено, що формування матриці фотонних кристалів найбільш ймовірно з силіцієвих олігомерів, які мають найбільшу молекулярну масу. З'ясовано, що з підвищенням ступеню олігомеризації силіцієвих олігомерів підвищується їх спорідненість до поверхні кремнезему, тобто, формування наступних рядів нанокристалу енергетично більш вигідне з олігомерів, що мають більшу молекулярну масу. Визначено, що молекули силіцієвих олігомерів мають невелику анізотропію просторових адсорбційних властивостей, яка зростає з підвищенням ступеню олігомеризації. Проведено моделювання розповсюдження електромагнітних хвиль у фотонних кристалах, що дозволяє визначати закономірності взаємодії електромагнітних хвиль з просторово впорядкованими системами з періодичною модуляцією діелектричної проникності. Встановлено граничне значення дефектності фотонного кристалу. Максимальне значення коефіцієнту пропускання фотонного кристалу, який має квадратну структуру та щільне розміщення структурних елементів, спостерігається при дії електромагнітних хвиль з довжиною, рівною періоду кристалічної решітки. Галузі застосування: М 72.19 - дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реферат англійською:

Object of research - Nanomaterials for photonic crystals. Goal - to determine the conditions of chemical interaction of nanodispersed ordered structures formation and their properties by means of computer simulations . Research methods - computer simulation. It was established that the formation of the matrix of photonic crystals is most likely from silicon oligomers which have the highest molecular weight . It was found that with increasing of degree of silicon oligomerization, their affinity to the silica surface increases for, ie the formation of following layers of nanocrystals is energetically more favorable from oligomers with a heavier molecular weight. It was determined that the molecule of silicon oligomers have low spatial anisotropy of adsorption properties, which increases with the degree of oligomerization. It was carried out the modelling of electromagnetic wave transmission in photonic crystals which allows to determine the patterns of interaction of electromagnetic waves with spatially ordered system with a periodic modulation of the dielectric constant. The limit values of defect structure of photonic crystal was found. Maximum transmittance of the photonic crystal, which has a square structure and dense placement of structural elements, observed in electromagnetic waves with a length equal to the period of the crystal lattice. Application: M 72.19 - Research and experimental development in other natural sciences and engineering .

Індекс УДК: 544, 678.046.361 + 541.121

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Черненко Іван Михайлович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Метод квантово-хімічних розрахунків хімічної взаємодії у середовищах з упорядкуванням

Назва НТП англійською: The method of quantum-chemical calculations of chemical interactions in environments with arrangement

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: DG 24.66.0

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Метод квантово-хімічних розрахунків хімічної взаємодії у середовищах з упорядкуванням полягає у вивченні взаємодії наночастинок – силіційових олігомерів – з вже утвореними первинними шарами матриці. По суті це є ніщо інше як параметри процесу адсорбції. Моделювання молекулярної динаміки процесу адсорбції силіційових олігомерів реалізовано з використанням модулю Adsorption location програми Materials Studio. Для розрахунку енергетичних параметрів міжмолекулярної взаємодії шляхом пошуку можливих конфігурації з мінімальною енергією адсорбції у програмі був використаний метод Монте-Карло.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: визначається замовником

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства з виробництва напівпровідникових матеріалів

Перспективні ринки: Україна, країни СНД та далекого зарубіжжя

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 3000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 6000

Очікуваний термін окупності (років): 5 р.

Додаткова інформація: співвласник

Назва НТП українською: Спосіб отримання нанодисперсного діоксиду ванадію

Назва НТП англійською: Method of obtaining of nanosized vanadium dioxide

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: DG 24.66.0

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Спосіб одержання нанодисперсного діоксиду ванадію належить до способів одержання оксидів ванадію (IV) у вигляді порошкоподібного продукту, що застосовується в електронній техніці, оптоелектроніці та автоматичності. Процес включає отримання золь-гель методом ванадату амонію, його термічне розкладання за температури 550 °С та наступну термообробку за температур 900-950 °С.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: визначається замовником

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства з виробництва напівпровідникових матеріалів

Перспективні ринки: Україна, країни СНД та далекого зарубіжжя

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 3000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 6000

Очікуваний термін окупності (років): 5 р.

Додаткова інформація: співвласник

ІХ. Бібліографічний опис

1. Свід. № 49170 Україна про реєстрацію авторського права на службовий твір Комп'ютерна програма Імітаційне моделювання седиментації колоїдних частинок [Текст] / Мисов О. П., Каюн І. Г., Калашников С. Г. (Україна); заявник та власник ДВНЗ "Укр. держ. хім.-технол. ун-т". – № 48532; заявл. 14.01.13; зареєстровано 18.05.13 в Державному реєстрі свідоцтв про реєстрацію авторського права на твір; 2. Пат. 100940 Україна, МПК (2013.01) C01G 31/00, C01B 13/18. Спосіб отримання нанодисперсного діоксиду ванадію [Текст] / Черненко І. М., Івон О. І., Колбунов В. Р., Олійник О. Ю. (Україна) ; заявник та патентовласник ДВНЗ "Укр. держ. хім. – техн. ун-т." – № а 2011 11195; заявл. 20.09.11 ; опубл. 11.02.13, Бюл. №3. – 5 с.; 3. Колесник, К. В. Рівноважні процеси утворення поліванадатів. 1. Рівновага у системі $V_2O_5-H_2O-H_2C_2O_4$ [Текст] / К. В. Колесник, О. П. Мисов, С. Г. Калашніков // Вопр. химии и хим. технологии. – 2013. – № 4. – С. 119-123; 4. Колесник, К. В. Рівноважні процеси утворення поліванадатів. 2. Рівновага у системі $V_2O_5-H_2O-H_2C_2O_4-NH_4OH$ [Текст] / К. В. Колесник, О. П. Мисов, С. Г. Калашніков // Вопр. химии и хим. технологии. – 2013. – № 5. – С. 177-181; 5. Каюн, І. Г. Моделювання седиментації частинок при формуванні наносистем [Текст] / І. Г. Каюн, О. П. Мисов, С. Г. Калашніков // Вопр. химии и хим. технологии. – 2013. – № 5. – С. 187-190; 6. Каюн, І. Г. Вплив закону розподілу частинок на щільність упаковки наноструктур. [Текст] / І. Г. Каюн, О. П. Мисов, С. Г. Калашніков

//Хімія та сучасні технології: тези допов. VI Міжнар. наук.-техн. конфер. студ., аспір. та молод. вчених / ДВНЗ "Укр. держ. хім.-техн. ун-т". – Дніпропетровськ, 2013. – С. 33; 7. Каюн, І. Г. Використання діелектрометрії при ідентифікації фракції тетраетоксисилану [Текст] / І. Г. Каюн, Ю. В. Бігняк // Хімія та сучасні технології: тези допов. VI Міжнар. наук.-техн. конфер. студ., аспір. та молод. вчених / ДВНЗ "Укр. держ. хім.-техн. ун-т". – Дніпропетровськ, 2013. – С. 28; 8. Колесник, Е. В. Получение тетраванадата (IV) аммония золь-гель методом [Текст] / Е. В. Колесник, О. П. Мысов, А. А. Гиренко // Хімія та сучасні технології: тези допов. VI Міжнар. наук.-техн. конфер. студ., аспір. та молод. вчених / ДВНЗ "Укр. держ. хім.-техн. ун-т". – Дніпропетровськ, 2013. – С. 90; 9. Кратік, О. Ю. Методика отримання тонких плівок оксиду ванадію (IV) золь-гель методом [Текст] / О. Ю. Кратік, К. В. Колесник // Хімія та сучасні технології: тези допов. VI Міжнар. наук.-техн. конфер. студ., аспір. та молод. вчених / ДВНЗ "Укр. держ. хім.-техн. ун-т". – Дніпропетровськ, 2013. – С. 95; 10. Акт впровадження в навчальний процес ДВНЗ УДХТУ результатів НДР від 23.12.2013 р.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Харченко Олександр Васильович

Перелік осіб-виконавців

Євтушенко Олександр Васильович

Бубель Тетяна Олександрівна

Гиренко Альона Олександрівна

Каюн Ігор Георгійович

Колесник Катерина Вікторівна

Мисов Олег Петрович

Олійник Ольга Юріївна

Черненко Іван Михайлович

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

