

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000649

Державний реєстраційний номер: 0119U100673

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Оптичні властивості кристалічних наноструктурних, дефектних матеріалів

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут монокристалів
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 00210217

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380573410314, 380573410229, 380573410210

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 10505.612
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Оптичні властивості кристалічних наноструктурних, дефектних матеріалів

Назва роботи англійською:

Optical properties of crystal nanostructured and defect materials

Реферат українською:

Виконано дослідження фундаментальних закономірностей, які пов'язані з наявністю домішкових дефектних структур у поширених оптичних кристалічних матеріалах та дефектних структур нано- та метаврозмірних матеріалах. Розвинуто непертурбативний підхід для вивчення нелінійного відгуку кількешарового графену на високочастотне електромагнітне поле. Виявлено фазовий перехід в стан "суперсолід" у розрідженому двовимірному газі електрон-діркових пар з просторово розділеними компонентами. Визначено інтенсивності генерації третьої гармоніки та фотопровідності для тришарового ABC-графену. Побудовано загальну теорію дифузійної еволюції газонаповнених пор у нано- та мезо-частинках. Методом молекулярної динаміки досліджено релаксацію внутрішньої порою з газом, що дозволило врахувати дискретну внутрішню будівлю частинки. Доведено, що характер релаксації пори визначається початковим фазовим станом кластера. Виявлено, що всередині твердих кластерів присутні "магічні" пори, які існують протягом тривалого часу. Визначено якісні відмінності між цими підходами, та режими у яких вони узгоджуються. Доведено, що для підвищення частки титану у стані Ti^{3+} кристал необхідно вирощувати у відновлювальних умовах. В окислювальних умовах переважає титан у стані Ti^{4+} , значна частка утворює подвійні та потрійні комплекси з вакансіями алюмінію. У відновлювальних умовах переважає титан у стані Ti^{3+} та пари $Ti^{3+} - Ti^{4+}$. Отримано співвідношення, що описує зв'язок між концентраціями простих і комплексних дефектів. За результатами досліджень визначено умови, за яких можливе підвищення оптичної якості такого важливого кристалу як Ti :сапфір.

Реферат англійською:

The study of fundamental regularities related to the presence of impurity defective structures in common optical crystalline materials and defective structures of nano- and meta-dimensional materials has been performed. A nonperturbative approach has been developed to study the nonlinear response of multilayer graphene to a high-frequency electromagnetic field. A phase transition to the "supersolid" state in a dilute two-dimensional gas of electron-hole pairs with spatially separated components has been revealed. The intensities of the third harmonic generation and photoconductivity for three-layer ABC-graphene were determined. The general theory of diffusion evolution of gas-filled pores in nano- and meso-particles is constructed. The relaxation of the internal gas pore was investigated by the method of molecular dynamics, which allowed to take into account the discrete internal structure of the particle. It is proved that the nature of pore relaxation is determined by the initial phase state of the cluster. It was found that inside solid clusters there are "magic" pores that do not disappear during the entire simulation time. Qualitative differences between these approaches and the modes in which they are consistent have been identified. It is proved that in order to increase the share of titanium in the Ti^{3+} state, the crystal must be grown under reducing conditions. Under oxidizing conditions, titanium in the Ti^{4+} state predominates, a significant proportion forming double and triple complexes with aluminum vacancies. Under reducing conditions, titanium in the Ti^{3+} state and $Ti^{3+} - Ti^{4+}$ vapors predominate. A relation is obtained that describes the relationship between the concentrations of simple and complex defects. According to the results of research, the conditions under which the optical quality of such an important crystal as Ti : sapphire can be improved are determined.

Індекс УДК: 548.571;548.4, [548.4-022.532:535]:004.942

Коди тематичних рубрик: 29.19.11

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Яновський Володимир Володимирович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Оптичні властивості кристалічних наноструктурованих, дефектних матеріалів

Назва НТП англійською: Optical properties of crystal nanostructural, defective materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Теоретичне прогнозування структури та властивостей нових неорганічних речовин та матеріалів

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Виявлено фундаментальні закономірності, які пов'язані з наявністю домішкових дефектних структур у поширених оптичних кристалічних матеріалах та дефектних структур нано- та метарозмірних матеріалах.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Фізика

Перспективні ринки: зарубіжні країни

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Болотин Ю.Л., Тур А.В., Яновский В.В, Физика планковского масштаба в терминах предельных величин, Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3, 2019, 398с, ISBN 978-966-285-594-4

В.П.Семиноженко, В.В.Яновский, Перед ликом Вселенной, НТК "Институт монокристаллов" НАН Украины, Харьков, Юнисофт, ISBN 978-966-935-910-0, 2020, 223с

В.П.Семиноженко, В.В. Яновський, Перед обличчям Всесвіту, НТК "Інститут монокристалів" НАН України, Харків, Юнісофт, 2021, 223сс., ISBN 978-966-935-930-8

Germash K. V., Fil D. V. Anderson–Bogoliubov and Carlson–Goldman modes in counterflow superconductors: case study of a double monolayer graphene. Phys. Rev. B. 2019. Vol. 99, Iss. 12. P. 125412(1–12).

DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.125412>

L. Yu. Kravchenko and D. V. Fil Control of charge state of dopants in insulating crystals: Case study of Ti-doped sapphire, Phys. Rev. Research 2, 023135 (2020). DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.023135>

D. V. Fil, S. I. Shevchenko, Stationary waves in a superfluid gas of electron-hole pairs in bilayers, Phys. Rev. B, 2021, v.103, No 20, pp. 205419(1-15). DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.205419>

V. D. Fil, D. V. Fil, G. A. Zvyagina, K. R. Zhekov, I. V. Bilych, D. A. Chareev, M. P. Kolodyazhnaya, A. Bludov, and E. Nazarova, Piezomagnetism of superconducting iron chalcogenides, Phys. Rev. B, 2021, v.104, No 9, pp. 094424(1-8). DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.094424>

M. I. Kopp, A. V. Tur, V. V. Yanovsky. Magnetic convection in a nonuniformly rotating electrically conductive medium in an external spiral magnetic field. Fluid Dynamics Research, 2021, v. 53, 015509(40 p.)

DOI:<https://iopscience.iop.org/issue/1873-7005/53/1>

D.M. Naplekov and V.V. Yanovsky. Internal chaotic sea structure and chaos-chaos intermittency in Hamiltonian systems. Phys. Rev. E, v. 103, p.022209, 2021 DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.022209>

M.I.Kopp,A.V.Tur, V.V.Yanovsky Vortex dynamo in a rotating stratified moist atmosphere driven by small-scale non-helical forces, Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics , 115(4), 2021, 0155092021

DOI:<https://doi.org/10.1080/03091929.2021.1946802>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Притула Ігор Михайлович

д. ф.-м. н., 01.04.10

Перелік осіб-виконавців

Бродський Роман Євгенійович

(к. ф.-м. н.)

Гермаш Костянтин Володимирович

(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Копп Михайло Йосипович

(к. ф.-м. н.)

Кравченко Людмила Юріївна

(к. ф.-м. н.)

Кулик Костянтин Миколайович

(к. ф.-м. н.)

Кулик Тетяна Василівна

Масловський Юрій Миколайович

(к. ф.-м. н.)

Наплеков Дмитро Михайлович

(к. ф.-м. н.)

Ратнер Марина Анатоліївна

(к. ф.-м. н.)

Філь Дмитро Вячеславович

(д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.07)

Щирова Наталія Вікторівна

Яновський Володимир Володимирович

(д.ф.-м.н., 01.04.07)

Відповідальний за підготовку

Голубнича Т.С.

облікових документів

Телефон

+38 (057) 341-04-49

Реєстратор

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

