Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U000090

Державний реєстраційний номер: 0121U112015

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Моделювання процесу анігіляції позитрона та визначення його часу життя в конструкційних матеріалах реакторів.

Початок етапу: 02.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380542223760, 380542222794

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, 01601, 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 150.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Спектроскопія часу життя позитронів в конструкційних матеріалах атомної енергетики

Назва роботи англійською:

Spectroscopy of positron lifetime in structural materials of atomics

Реферат українською:

Розвинуто аналітичні підходи для обчислення часу життя позитрона в матеріалі з урахуванням локальних змін електронної густини, що пов'язана з його дефектною структурою. Розвинуто модель Тао-Елдрупа, яка дозволяє аналітично розрахувати час життя позитрона в сферично симетричній потенціальній ямі, на випадок коли враховується тунелювання через межі потенціальної ями в основний матеріал та всередину ями. Показано, що з ростом висоти або ширини потенціальної ями значення часу життя досить швидко зростає. Розвинена модифікована модель дає важливу інформацію для аналізу спектрів часу життя позитронів в опромінених матеріалах та дані для верифікації кількісних розрахунків методами функціоналу щільності, що широко використовується для таких задач. Показано, що програмний пакет ABINIT дозволяє розраховувати розподіл електронної та позитронної густини поблизу вакансії в різних типах матеріалів. В свою чергу це дає можливість визначити характерну висоту та ширину ями для порівняння аналітичних результатів обчислення часу життя позитронів в дефектах конструкційних матеріалів реакторів з результатами моделювання, що буде використовуватися при прогнозі та аналізі результатів експериментальних вимірювань для опромінених зразків.

Реферат англійською:

Analytical approaches have been developed to calculate the lifetime of a positron in a material taking into account local changes in the electron density associated with its defective structure. The Tao-Eldrup model was developed, which allows analytically calculating the lifetime of a positron in a spherically symmetric potential well, in the case when tunneling through the boundaries of the potential well into the base material and into the well is taken into account. It is shown thatthe value of the life time increases rather quickly when the height or width of the potential well increases. The developed modified model provides important information for the analysis of positron lifetime spectra in irradiated materials and data for verification of quantitative calculations by density functional methods, which are widely used for such tasks. It is shown that the ABINIT software package allows calculating the distribution of electron and positron density near vacancies in various types of materials. In turn, this makes it possible to determine the characteristic height and width of the well for comparing the analytical results of calculating the lifetime of positrons in the defects of the structural materials of the reactors with the results of modeling, which will be used in the prediction and analysis of the results of experimental measurements for irradiated samples.

Індекс УДК: 548.571; 548.4 , 539.24/.27; 548.73/.75; 538.913.08

Коди тематичних рубрик: 29.19.11, 29.19.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лебедь Олександр Анатолійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: с.д.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Алгоритми моделювання процесу анігіляції позитрона на основі теорії функціоналу густини та аналітичні підходи для визначення часу життя позитрона в конструкційних матеріалах реакторів

Назва НТП англійською: Algorithms for modeling the positron annihilation process based on the density functional theory and analytical approaches for determining the positron lifetime in reactor construction materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19. Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Нові аналітичні підходи дозволяють обчислювати часу життя позитрона в матеріалі з урахуванням локальних змін електронної густини, що пов'язана з його дефектною структурою. Представлена модифікована модель Тао-Елдрупа дозволяє аналітично розрахувати час життя позитрона в потенціальній ямі скінченної висоти з врахуванням тунелювання через межі потенціальної ями в основний матеріал та всередину ями. Розвинена модифікована модель дає важливу інформацію для аналізу спектрів часу життя позитронів в опромінених матеріалах та дані для верифікації кількісних розрахунків часу життя позитрона методами функціоналу щільності, що широко використовується для таких задач.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Ворона М. І., Денисенко О.І., Лебедь О.А. Методи визначення швидкості анігіляції позитронів в конструкційних матеріалів реакторів//Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики: матеріали VII Всеукраїнської науково-практичної конференції студентів, молодих учених, науково-педагогічних працівників та фахівців з міжнародною участю, присвяченої 30-річчю незалежності України. м. Суми, 12-14 квітня 2021 р. – Суми: СумДПУ, 2021. – с. 23-24.

Marina Vorona, Oleksandr Lebed Pseudopotential method for description of positron annihilation in spherically symmetric potential//XII Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics", December 21 – 22, 2021, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics Kyiv, Ukraine, p. 5-6.

Ворона М.І., Лебедь О.А. Час життя позитронів в потенціальній ямі в модифікованій моделі Тао-Елдрупа//Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики: матеріали VIII Всеукраїнської науково-практичної конференції з міжнародною участю, м. Суми, 24-26 жовтня 2022 р. – Суми: ІПФ НАН України, 2022. – с.16-17.

М. І. Ворона, О. А. Лебедь Анігіляція позитронів у точкових дефектах реакторних матеріалів у модифікованій моделі Тао - Елдрупа//XXIX щорічна наукова конференція Інституту ядерних досліджень НАН України (Київ, 26 - 30 вересня 2022 року) , с.134-135

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Сторіжко Володимир Юхимович
д.ф.-м.н., 01.04.16, 01.04.20

Перелік осіб-виконавців

Ворона Марина Іванівна

Крикля Сергій Володимирович

Овчаренко Артур Юрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Ворошило О.І.

Телефон

+38 (054) 222-46-08

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

