Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U005035

Державний реєстраційний номер: 0117U003923

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Обчислення механічних параметрів двовимірних карбідів титану Tin+1Cn

Початок етапу: 10.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Сумський державний університет

Код за ЄДРПОУ: 05408289

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0542)334108, 334049

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 120

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих наночастинок

Назва роботи англійською:

Physical properties of the two-dimensional nanomaterials and metallic nanoparticles

Реферат українською:

Для двовимірних карбідів титану, з загальною хімічною формулою Tin+1Cn було розроблено комп'ютерну схему, для чисельного моделювання динамічної поведінки досліджуваних зразків. Розроблена комп'ютерна модель базується на методах класичної молекулярної динаміки, та дозволяє досліджувати основні фізичні та структурні властивості зазначених модельних зразків. В рамках розробленої моделі було реалізовано алгоритм дії зовнішньої згинаючої сили на досліджуваний зразок, що дозволило дослідити механічні властивості Tin+1Cn при згинаючій деформації. Проведено моделювання згинаючої деформації двовимірних карбідів титану Tin+1Cn, під час якого були розраховані атомістичні конфігурації та фізичні характеристики досліджуваних зразків. Отримані результати розрахунків порівняно з наявними в літературі аналогічними даними для інших двовимірних матеріалів, зокрема таких як графен та двовимірний дісульфід молібдену MoS2.

Реферат англійською:

Computer algorithm for numerical simulation of the dynamical behaviour of two-dimensional titanium carbides with general chemical formula Tin+1Cn was developed. Developed computer model is based on the classical molecular dynamics technique and allows to investigate main physical and structural properties of the simulated samples. Within proposed approach algorithm of the external bending load was also implemented, and mechanical properties of the Tin+1Cn samples under bending deformation were investigated. During the simulation of bending deformation of two-dimensional titanium carbides Tin+1Cn, atomistic configurations and physical characteristics of the samples were calculated. Obtained results are compared with available in the literature similar data for other two-dimensional materials, namely graphene and two-dimensional MoS2.

Індекс УДК: 539.1.08, 539

Коди тематичних рубрик: 29.15.39

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Борисюк Вадим Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерний алгоритм для моделювання поведінки двовимірних наноматеріалів під дією зовнішнього навантаження. Результати дослідження процесів деформації згинання досліджуваних зразків.

Назва НТП англійською: Computer algorithm for simulation of the two-dimensional nanomaterials under external load. Комп'ютерний алгоритм для моделювання поведінки двовимірних наноматеріалів під дією зовнішнього впливу. Results of the simullation of bending deformation of the samples.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.1

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: При виконанні роботи для двовимірних карбідів титану, з загальною хімічною формулою Tin+1Cn було розроблено комп'ютерну схему, для чисельного моделювання динамічної поведінки досліджуваних зразків. Розроблена комп'ютерна модель базується на методах класичної молекулярної динаміки, та дозволяє досліджувати основні фізичні та структурні властивості зазначених модельних зразків. В рамках розробленої моделі було реалізовано алгоритм дії зовнішньої згинаючої сили на досліджуваний зразок, що дозволило дослідити механічні властивості Tin+1Cn при згинаючій деформації.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2017 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Сумський державний університет та інші ВНЗ

Перспективні ринки: України

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

V. M. Borisyuk, U.S. Shvets, Determining melting temperature of bimetallic Au@Ag nanoparticle within numerical simulation methods // Journal of Nano- and Electronic Physics - 2017. - V. 9, № 6, P. 06014(4pp).

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Васильєв Анатолій Васильович

к. т. н.

Перелік осіб-виконавців

Багдасарян Артем Анатолійович

Васюхно Катерина Віталіївна

Дворниченко Аліна Василівна

Кравченко Ярослав Олегович

Максакова Ольга Василівна

Марченко Ігор Олександрович

Маценко Світлана Михайлівна

Смирнова Катерина Василівна

Тарасенко Юлія Олександрівна

Трощенко Дар'я Сергіївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності