

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U001683

Державний реєстраційний номер: 0112U004436

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-01-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Використання грид технологій для першопринципного моделювання енергетики точкових дефектів в берилії: водень, гелій і атомні вакансії

Початок етапу: 04.2012

Закінчення етапу: 12.2012

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 424-10-20

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594, 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: 2.3 - виконання робіт за державними цільовими програмами

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 75

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Використання ґрид технологій для першопринципного моделювання енергетики точкових дефектів в берилії: водень, гелій і атомні вакансії

Назва роботи англійською:

Using Grid technology for ab-initio simulation of energy of point defects in beryllium: hydrogen, helium and atomic vacancies

Реферат українською:

Досліджено всі можливі позиції втіленого атома водню і знайдено його рівноважні положення в кристалічній ґратці. Розраховано енергії зв'язку одиночного атома водню, енергії формування і міграції вакансій. Досліджено з перших принципів воднево і гелієво-вакансійних комплекси в ГЦУ берилії. Обчислено фононні спектри кристалу з гелієм, які можна перевірити експериментально.

Реферат англійською:

Studied all possible positions of the interstitial atom of hydrogen and found its equilibrium position in the crystal lattice. Calculated energy of a single hydrogen atom, the energy of formation and migration of vacancies. Studied hydrogen- and helium-vacancy complexes in beryllium in the hcp lattice of beryllium by methods ab-initio simulations. Calculated phonon spectra of crystals with helium, which can be verified experimentally.

Індекс УДК: 539.24/.27;548.73/.75;538.913.08, 537.613:537.637

Коди тематичних рубрик: 29.19.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Бар'яхтар В.Г.

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Фононні спектри гелію, розчиненого в ГЦУ графті берилія

Назва НТП англійською: The phonon spectra of helium dissolved in the hcp lattice of beryllium

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Фундаментальні та прикладні дослідження в області фізики наднизьких температур

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджено всі можливі позиції втіленого атома водню і знайдено його рівноважні положення в кристалічній ґратці. Розраховано енергії зв'язку одиночного атома водню, енергії формування і міграції вакансій. Досліджено з перших принципів воднево і гелієво-вакансійних комплекси в ГЦУ берилії. Обчислено фононні спектри кристалу з гелієм, які можна перевірити експериментально.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: п'ять років

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НАН України

Перспективні ринки: Україна, країни ближнього та дальнього зарубіжжя

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

A.S. Bakai, A.N. Timoshevskii, B.Z. Yanchitsky, S.O. Yablonovskiy "On chemical bonding of Helium with hcp-Beryllium" відправлена до друку в журнал Journal of Physics Condensed Matter.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Бар'яхтар Віктор Григорович

Перелік осіб-виконавців

Бакай О.С.

Бар'яхтар В.Г.

КалькутаС.А.

Тимошевський А.М.

Яблоновський С.О.

Янчицький Б.З.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

