

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U006168

Державний реєстраційний номер: 0117U003923

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-04-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Моделювання процесів плавлення двовимірних карбідів титану $Ti_{in}+1Cn$ та металевих наночастинок

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього 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)

Напрямок 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.): 518.6
--

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:

Розроблено комп'ютерні схеми, для чисельного моделювання процесів плавлення двовимірних карбідів титану та металевих наночастинок в рамках методів класичної молекулярної динаміки. Запропонована комп'ютерна модель дозволяє досліджувати структурні властивості зазначених модельних зразків під час зростання температури та розраховувати наближені значення температури плавлення. Реалізовано алгоритм підвищення температури з використанням методу термостату Берендсена. Проведено моделювання процесів плавлення під час якого були розраховані атомістичні конфігурації, середні значення потенціальної енергії, та структурні параметри досліджуваних зразків, такі як функції радіального розподілу та показники Ліндемана.

Реферат англійською:

Computer algorithms for simulation of the melting processes of two-dimensional titanium carbides and metallic nanoparticles by molecular dynamics methods were developed. Proposed model allows to investigate structural properties of the mentioned simulated samples during heating and to calculate the approximate values of the melting temperatures. Heating process is simulated via Berendsen thermostat algorithm. Simulations of the melting process were performed to calculate atomistic configurations, averaged potential energies and structural parameters such as Lindemann indexes and radial distribution functions for the samples under investigation.

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 процесів плавлення досліджуваних наноматеріалів методами класичної молекулярної динаміки. Алгоритми розрахунку структурних параметрів модельних зразків. Дані числових розрахунків координат та швидкостей атомів залежно від температури досліджуваних зразків наноматеріалів.

Назва НТП англійською: Computer algorithm for simulation of the melting process of nanomaterials under investigation by molecular dynamics methods. Algorithms for calculation of structural parameters of simulated samples. Calculated data of coordinates and velocities of atoms depending on the temperature 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: Для двовимірних карбідів титану, Ti_n+1C_n з $n=1, 2$ і 3 (англ. MXenes) та металевих наночастинок були розроблені комп'ютерні схеми, для чисельного моделювання процесів плавлення в рамках методів класичної молекулярної динаміки. Розроблена комп'ютерна модель дозволяє досліджувати структурні властивості зазначених модельних зразків під час зростання температури та розраховувати наближені значення температури плавлення. Реалізовано алгоритм підвищення температури з використанням методу термостату Берендсена, що дозволило проаналізувати температурну стабільність та поведінку під час плавлення досліджуваних зразків. З отриманих результатів розраховані наближені значення температур плавлення для досліджуваних зразків, які склали 1050 K, 1500 K і 1700 K для Ti_2C , Ti_3C_2 і Ti_3C_4 відповідно. Отримані дані вказують на те, що плавлення двовимірних карбідів титану відбувається при значно нижчих температурах ніж плавлення графену та двовимірного дисульфиду молібдену.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2018 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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

IX. Бібліографічний опис

1) Vadym N. Borysiuk, Vadym N. Mochalin, Yury Gogotsi, Bending rigidity of two-dimensional titanium carbide (MXene) nanoribbons: A molecular dynamics study // Computational Materials Science. - 2018. -V. 143. - P. 418-424. 2) Ya.O Kravchenko, L.E. Coy, B. Peplinska, I. Iatsunskyi, K. Zaleski, M. Kempinski, V.M. Beresnev, P. Konarski, S. Jurga, A.D. Pogrebnjak, Nano-multilayered coatings of (TiAlSiY) N/MeN (Me= Mo, Cr and Zr): Influence of composition of the alternating layer on their structural and mechanical properties // Journal of Alloys and Compounds. - 2018. - V. 767, pp.483-495. 3) A.V Pshyk, Ya. Kravchenko, E. Coy, M. Kempinski, I. Iatsunskyi, K. Zaleski, A. D Pogrebnjak, S. Jurga, Microstructure, phase composition and mechanical properties of novel nanocomposite (TiAlSiY) N and nano-scale (TiAlSiY) N/MoN multifunctional heterostructures // Surface and Coatings Technology. - 2018. - V. 350, pp. 376-390. 4) A.D. Pogrebnjak, Ya. O. Kravchenko, O.V. Bondar, B. Zhollybekov, A.I. Kupchishin, Structural Features and Tribological Properties of Multilayer Coatings Based on Refractory Metals // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. - 2018. - V. 54, pp.240-258. 5) O. V. Maksakova, S. Simoes, A. D. Pogrebnjak, O. V. Bondar, Ya. O. Kravchenko, T. N. Koltunowicz, Zh. K. Shaimardanov, Multilayered ZrN/CrN coatings with enhanced thermal and mechanical properties // Journal of Alloys and Compounds, vol. - 2019. - V. 776, pp.679-690. 6) O.V. Maksakova, O.D. Pogrebnjak, V.M. Beresnev, Features of Investigations of Multilayer Nitride Coatings Based on Cr and Zr // Usp. Fiz. Met. - 2018. - V. 19, pp.25-48. Патент України на корисну модель: Кравченко Я. О., Погребняк О. Д., Юрченко Д. Ю., Шахова І. М., Виріб або інструмент з багатокомпонентним нанодисперсним високоентропійним покриттям, No.127768 (2018).
Захищено кандидатську дисертацію за темою: "Нерівноважна еволюційна термодинаміка фрагментації металів з урахуванням стохастичності", Трощенко Дар'я Сергіївна (2018). Публікації та тези у матеріалах конференцій 1) Maksakova O.V., Pogrebnjak A.D., Simoes S., Morphology, structure and thermal properties of multilayer ZrN/CrN coatings, 2018 IEEE 38th International Conference Electronics and Nanotechnology, 24-26 April 2018, Kyiv, 106-109. 2) Ya.O Kravchenko, O.V. Bondar, A.D. Pogrebnjak, K. Piotrowska, Development of multilayer condensates based on refractory compounds with a variable composition of the second layer in the bilayer, XII-th International Conference on Ion Implantation and other Applications of Ions and Electrons - ION 2018 - 18-21.06.2018 r., Kazimierz Dolny. 3) Ya.O. Kravchenko, I. Iatsunskyi, A.D. Pogrebnjak, O.V. Maksakova, K. Kierczynski, T.N. Koltunowicz, P. Zukowski, Structure and phase composition of nanostructured functional coatings (TiAlSiY)N/MoN, XII-th International Conference on Ion Implantation and other Applications of Ions and Electrons - ION 2018 - 18-21.06.2018 r., Kazimierz Dolny. 4) Ya. Kravchenko, B. Natalich, M. Opielak, D. Zakharova, Multifractal anlysis of the surfaces of protective (TiAlSiY)N, Me1-xN/CrN and Me1-xN/ZrN coatings, 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties, 9-14 September 2018, Odesa.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Васильєв Анатолій Васильович

К. Т. Н.

Перелік осіб-виконавців

Дворниченко Аліна Василівна

Захарова Діана Сергіївна

Котенко Марія Ігорівна

Кравченко Ярослав Олегович

Ляшенко Яків Олександрович

Максакова Ольга Василівна

Маценко Світлана Михайлівна

Могильних Марія Андріївна

Трощенко Дар'я Сергіївна

Шелест Ігор Владиславович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

