

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000560

Державний реєстраційний номер: 0121U11337

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Теоретичне тестування плівок дихалькогенідів перехідних металів

Початок етапу: 06.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 54, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50086, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380564701334, 380564701368

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: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 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: 2.7 - інше

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201380

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 10.400

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Забезпечення виконання перспективного плану розвитку пріоритетного наукового напрямку "Математичні науки та природичі науки" у Криворізькому державному педагогічному університеті

Назва роботи англійською:

Ensuring the implementation of a long-term plan for the development of the priority scientific direction "Mathematical Sciences and Natural Sciences" at Kryvyi Rih State Pedagogical University

Реферат українською:

Проведені теоретичні розрахунки із перших принципів, встановлено особливості перерозподілу заряду на атомах Se плівок TaSe₂ з молекулами полімерних електролітів LiClO₄ або (та) PEO як матеріалу аноду батарей, що контролюють рух іонів літію в ньому, за рахунок модифікації потенціальних рельєфів.

Реферат англійською:

Theoretical calculations from the first principles are carried out. The peculiarities of charge redistribution on Se atoms of TaSe₂ films with molecules of polymer electrolytes LiClO₄ or (and) PEO as a material of the battery anode, controlling the movement of lithium ions in it by modifying potential reliefs.

Індекс УДК: 539.2; 538.9Ф405;548

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Балабай Руслана Михайлівна

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: моделі анодів іонних батарей

Назва НТП англійською: models of anodes of ion batteries

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Атомні моделі плівок дихалькогенідів на основі TaSe₂ з полімерними електролітами LiClO₄, PEO, LiClO₄/PEO як аноди батарей з інтеркальованими у їх міжшаровий простір атомами Li. Розподіли густини ва

Галузь застосування: Фізика твердого тіла, освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів досліджено плівки дихалькогенідів перехідних металів TaSe₂ з полімерним електролітом LiClO₄/PEO, для анодів літій- та натрій-іонних батарей.

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: 06.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: моделі анодів іонних батарей

Назва НТП англійською: models of anodes of ion batteries

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Атомні моделі плівок дихалькогенідів на основі TaSe₂ з полімерними електролітами LiClO₄, PEO, LiClO₄/PEO як аноди батарей з інтеркальованими у їх міжшаровий простір

атомами Li. Розподіли густини вал

Галузь застосування: Фізика твердого тіла, освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів досліджено плівки дихальогенідів перехідних металів TaSe₂ з полімерним електролітом LiClO₄/PEO, для анодів літій- та натрій- іонних батарей.

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: 06.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Balabai R.M., Prikhozha Yu.O. The Comparison of Intercalation of Na and Li Atoms in a SnS₂ Anode of Battery: ab initio Calculation // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii. 2021, т. 19, № 2, сс. 273–280.
https://www.imp.kiev.ua/nanosys/en/articles/2021/2/nano_vol19_iss2_p0273p0280_2021_abstract.html
2. Balabai R. M., Prikhozha Yu.O. Intercalation of Li Atoms in TaSe₂ Film's Anode with LiClO₄/PEO Polymer Electrolyte: First Principles Calculatio

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Шрамко Ярослав Владиславович
д. філос. н., 09.00.06

Перелік осіб-виконавців

Балабай Руслана Михайлівна
(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Прихожа Юлія Олександрівна
(д.філософ, 104)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Горбович Лілія Миколаївна

Телефон

+38 (098) 223-56-39

Реєстратор

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

