

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U103601

Державний реєстраційний номер: 0117U003923

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-10-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Моделювання адсорбції металевих наночастинок на поверхні двовимірних наноматеріалів.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 09.2020

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 05408289

Місцезнаходження: вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380542334058

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.): 471.425
--

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 росту срібних наночастинок на поверхні двовимірного карбіду титану Ti_2C в рамках методів класичної молекулярної динаміки. Розроблений підхід дозволяє моделювати осадження атомів інших металів на поверхню двовимірних карбідів $Ti_{n+1}C_n$ з різною площею поверхні росту, а також розраховувати сили взаємодії між частинкою та поверхнею. Проведено серію експериментів по осадженню атомів срібла на поверхню двовимірного Ti_2C з трьома різними значеннями площі поверхні росту, а також розглянуто випадки з гідрофобним та гідрофільним типом поверхні. Проведено розрахунки сил взаємодії між срібною наночастиною та двовимірним Ti_2C в стаціонарному випадку, за умови прикладеного зовнішнього навантаження. Розглянуто випадки з трьома різними значеннями зовнішньої сили.

Реферат англійською:

Computer algorithms for simulation of growth processes of silver nanoparticles at the surface of two-dimensional titanium carbide Ti_2C were developed within the classical molecular dynamics methods. Developed approach allows to simulate the deposition of atoms of other metals onto the surface of two-dimensional carbides $Ti_{n+1}C_n$ with different area of growth surface and to calculate interaction forces between nanoparticle and the surface. Series of experiments concerning the deposition of atoms of silver onto surface of two-dimensional Ti_2C with three different values of growth surface were performed. Two types of interaction between nanoparticle and surface of Ti_2C were considered. Forces between nanoparticle and surface of Ti_2C were calculated in the stationary case and in the case of external load. Three values of external load also were considered.

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: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерний алгоритм для моделювання процесів росту металевих наночастинок на поверхні двовимірних карбідів титану в рамках методів класичної молекулярної динаміки. Розраховані залежності сил міжатомної взаємодії та атомістичні конфігурації.

Назва НТП англійською: Computer algorithm for simulation of growth process of metallic nanoparticles at the surface of two-dimensional titanium carbides by molecular dynamics methods. Calculated dependencies of interatomic forces and atomistic configurations.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 73.1.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Наведено детальний опис комп'ютерних моделей та представлено результати моделювання у виді розрахованих залежностей та атомістичних конфігурацій. При виконанні четвертого етапу науково-дослідної роботи була розроблена комп'ютерна модель, яка дозволяє в загальному випадку моделювати процеси росту срібних наночастинок на поверхні двовимірного карбиду титану Ti₂C. При цьому можуть бути розглянуті випадки з різним рівнем гідрофільності поверхні, в залежності від параметрів моделі. Також розроблені алгоритми дозволяють провести якісні дослідження сил взаємодії між наночастинками та поверхнею двовимірного зразка Ti₂C при зсуві частинок по його поверхні. Отримані під час виконання етапу результати можуть бути використанні для дослідження процесів росту металевих наночастинок на поверхні двовимірних карбідів титану, з метою покращення якості отриманих в такий спосіб гібридних наноматеріалів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 09.2020

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):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

- Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science: 1. B.V. Natalich, Ya.O. Kravchenko, O.V. Maksakova, O.M. Bogatyr, V.M. Borysiuk, Thermal stability and melting of the core-shell Pd@Pt nanocube: a molecular dynamics study, High Temperature Material Processes 24(2):121–130 (2020).
2. I. A. Lyashenko, V. N. Borysiuk, V. L. Popov, Dynamical model of the asymmetric actuator of directional motion based on power-law graded materials, Mechanical Engineering Vol. 18, No 2, 2020, pp. 245 – 254
<https://doi.org/10.22190/FUME200129020L>.
3. М. Ляшенко, Я.О. Ляшенко, Вплив просторової неоднорідності на формування хаотичних режимів процесу самоорганізації, Український фізичний журнал Т. 65, № 2 (2020) 128–140.
4. Ya. O. Kravchenko, E. Coy, B. Peplinska, I. Iatsunskyi, K. Zaleski, M. Kempinski, V. M. Beresnev, A. V. Pshyk, A.D. Pogrebnyak, Micro-mechanical investigation of (Al₅₀Ti₅₀)N coatings enhanced by ZrN layers in the nanolaminate architecture, Applied Surface Science, 534 (2020) 147573 doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147573.
5. V. Borysiuk. Simulation of Fracture Dynamics of Two-dimensional Titanium Carbide Ti₂C under Different Types of Tensile Loading, JOURNAL OF NANO-AND ELECTRONIC PHYSICS, Vol.12 No4, 04005(4pp)(2020).
[https://doi.org/10.21272/jnep.12\(4\).04005](https://doi.org/10.21272/jnep.12(4).04005).
6. Монографія Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих наночастинок : монографія / В. М. Борисюк, О. В. Максакова. – Суми : Сумський державний університет, 2020. – 100 с. ISBN 978-966-657-810-8

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Васильєв Анатолій Васильович
К. Т. Н.

Перелік осіб-виконавців

Богатир Олена Михайлівна
Кравченко Ярослав Олегович
(к. ф.-м. н.)
Максакова Ольга Василівна
Могильних Марія Андріївна
Наталіч Богдан Владиславович
Харченко Василь Олегович
(д. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Мельник Н.В.

Телефон

+38 (054) 268-44-02

Реєстратор

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

