Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U006542

Державний реєстраційний номер: 0113U004055

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-01-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: "Молекулярно-динамічне дослідження механічних властивостей і фазових переходів плавлення - кристалізація в наноструктурах тугоплавких карбідів перехідних металів" - перший рік виконання проекту.

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 4240102 , 4242131

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

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 140

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Молекулярно-динамічне дослідження механічних властивостей і фазових переходів плавлення - кристалізація в наноструктурах тугоплавких карбідів перехідних металів.

Назва роботи англійською:

Molecular dynamic study of mechanical properties and phase transitions melting - crystallization in nanostructures of refractory transition metal carbides.

Реферат українською:

Розроблено модель міжатомних взаємодій в тугоплавких карбідах d- перехідних металів, що дозволяє ефективно використовувати метод молекулярної динаміки для проведення віртуальних випробувань нанокристалів на міцність при різних видах навантаження в широкому інтервалі температур. Проведено розрахунки лінійного розтягування нанокристалу карбіду титану до руйнування при температурах 300, 1000, 2000, 3000 3530 K. Результати показують перспективність запропонованого методу для дослідження атомних механізмів деформації і руйнування наноматеріалів. Проведені обчислювальні експерименти по сегментації нанокластерів. Показано, що навіть метастабільні плоскі форми типу Ti5C4 і Ti4C5 можуть мимоволі утворювати нанокластери Ti14C13 і Ti13C14 різної форми, залежно від початкової відстані і відносної орієнтації вільних площин.

Реферат англійською:

A model of interatomic interactions in refractory carbides d - transition metals, which allows efficient use of the molecular dynamics method for virtual testing the strength of nanocrystals with different kinds of load over a wide temperature range is developed. The calculations of linear expansion of nanocrystals of titanium carbide to failure at temperatures of 300, 1000, 2000, 3000, 3530 K are carried out. The results show that the proposed method is promising for studying atomic mechanisms of deformation and fracture of nanomaterials. Computational experiments on segmentation of nanoclusters are carried out. It is shown that even metastable flat shapes of Ti5C4 Ti4C5 can spontaneously form nanoclusters Ti14C13, Ti13C14 of different shapes, depending on the initial distance and the relative orientation of the planes.

Індекс УДК: 53.072;53:004, 539.23 53.072 53.004 620.22:620.17

Коди тематичних рубрик: 29.03.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Скороход Валерій Володимирович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Пакет програм для проведення молекулярно-динамічного моделювання поведінки нанокристалів карбіду титану при різних механічних впливах.

Назва НТП англійською: Software package for molecular dynamics simulation of the behavior of titanium carbide nanocrystals with different mechanical impacts.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Встановлені атомні механізми деформації і руйнування нанокристалів

Галузь застосування: М 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено пакет програм моделювання властивостей нанокристалів карбіду титану, за допомогою якого проведено моделювання процесів деформації і розтягування нанодротів карбіду титану методом молекулярної динаміки.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2013 - звіт про НДР

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ІПМ НАН України, наукові інститути НАН України

Перспективні ринки: Україна, СНД

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

Огородников В. В., Григорьев О. Н., Бекенев В. Л., Картузов В. В. Межатомные потенциалы взаимодействия для особотугоплавких соединений // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. - К.: Труды ИПМ НАНУ, 2013. - Вып. 15. С. 86-97.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Скороход Валерій Володимирович

Перелік осіб-виконавців

А.В. Хачатрян

А.О. Лісенко

В. В. Картузов

В. В. Огородников

В.Л. Бекененьов

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

