

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U004999

Державний реєстраційний номер: 0124U003818

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-12-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Реалізація алгоритмів машинного навчання для оптимізації параметрів кремнієвих структур

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 11.2025

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442393333

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, Київ, 01001, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442981629

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрямок фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2798.591

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка принципів створення та машинно-орієнтованої характеристики поруватих кремнієвих наноструктур з оптимальними теплотранспортними властивостями

Назва роботи англійською:

Development of principles for the creation and machine-oriented characterization of porous silicon nanostructures with optimal heat transport properties

Реферат українською:

Проект спрямований на розробку принципів створення та машинного аналізу мультишарових поруватих кремнієвих наноструктур з метою оптимізації їх теплотранспортних властивостей. Дослідження базується на комплексній стратегії, що поєднує експериментальний синтез, фотоакустичні вимірювання та багаторівневе комп'ютерне моделювання. На поточному етапі реалізовано синтез серій моно- та мультишарових структур з керованою морфологією методом електрохімічного травлення та проведено їх структурну характеристику. Для дослідження теплоперенесення застосовано фотоакустичний газо-мікрофонний метод, результати якого інтегровано з чисельними розрахунками методом скінченних елементів та молекулярної динаміки. Це дозволило верифікувати фізичні моделі теплового транспорту та кількісно оцінити вплив граничних теплових опорів на ефективну теплопровідність мультишарової системи. Важливим досягненням етапу стало налаштування моделей машинного навчання на основі сформованої бази даних для прогнозування властивостей та оптимізації конфігурацій шарів. Отримані результати створюють надійну платформу для сучасного матеріалознавства, відкриваючи нові можливості для проектування енергоефективних матеріалів, теплових бар'єрів та сенсорних елементів мікроелектроніки.

Реферат англійською:

The project focuses on developing principles for the fabrication and machine-learning-based analysis of multilayer porous silicon nanostructures to optimize their thermal transport properties. The research relies on a comprehensive strategy combining experimental synthesis, photoacoustic measurements, and multilevel computational modeling. At the current stage, a series of mono- and multilayer structures with controlled morphology have been synthesized via electrochemical etching, followed by their structural characterization. To investigate heat transfer, the gas-microphone photoacoustic method was employed, with results integrated with numerical calculations using the Finite Element Method and Molecular Dynamics. This approach enabled the verification of physical heat transport models and the quantitative assessment of the impact of interfacial thermal resistances on the effective thermal conductivity of the multilayer system. A key achievement of this stage was the configuration of machine learning models, based on the established database, to predict properties and optimize layer configurations. The obtained results provide a robust platform for modern materials science, opening new avenues for designing energy-efficient materials, thermal barriers, and microelectronic sensor elements.

Індекс УДК: 538-953Ф405

Коди тематичних рубрик: 29.19.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лішук Павло Олександрович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерне моделювання теплоперенесення

Назва НТП англійською: Computer simulation of heat transfer

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмні продукти, програмно-технологічна документація

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Основним досягненням продукції є створення інтегрованої обчислювальної системи, що поєднує результати чисельного моделювання із моделями машинного навчання (ML). Розроблені алгоритми налаштовано на прогнозування теплопровідності та оптимізацію конфігурацій мультишарових структур поруватого кремнію. Сприяє збереженню енергоресурсів завдяки створенню енергоефективних матеріалів для термоелектрики та електроніки. Використання методів комп'ютерного моделювання та ML мінімізує витрати матеріалів та реактивів, замінюючи частину фізичних експериментів віртуальними розрахунками.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля: Реалізація та використання НТП не передбачає негативного впливу на довкілля. Навпаки, впровадження результатів сприятиме екологічній безпеці та енергозбереженню.

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 11.2025

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

Determination the iron concentration in silicon solar cells using photovoltaic parameters and machine learning / Oleg Olikh, Oleksii Zavhorodnii // Solar Energy, Volume 300, 2025, 113754, ISSN 0038-092X.

<https://doi.org/10.1016/j.solener.2025.113754>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038092X25005171>

Iron's impact on silicon solar cell execution: Comprehensive modeling across diverse scenarios / Oleg Olikh, Oleksii Zavhorodnii // Materials Science and Engineering: B, Volume 317, 2025, 118192, ISSN 0921-5107,

<https://doi.org/10.1016/j.mseb.2025.118192>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921510725002156>

Variability in FeB Pair Association Rates in Silicon under Ultrasound Loading: Effects of Acoustic Wave Types / Oleg Olikh, Nikolai Arutyunov // Solid State Phenomena, Volume 374, 2025, 69-77, <https://doi.org/10.4028/p-Gy5yny> <https://www.scientific.net/SSP.374.69>

Multilayer Porous Silicon Structures: Experimental Insights into Heat Transfer under Controlled Fabrication Conditions / Lishchuk, P.O., Chepela, L.I., Borovyi, M.O., Olikh, O.Y., Plyushchay, I.V., Shevchenko, V.B., Kalyuzhnyi, D.Y., Popiuk, K.V., Isaiev, M.V. // Materials of XX International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems, October 6-10, 2025, Ivano-Frankivsk, Ukraine, p. 24.

Controlling the Morphology of Porous Silicon Matrices by Varying the Electrolyte Composition during Electrochemical Etching / Viktoria Shevchenko, Maksym Lazarenko, Petro Teselko // Book of Abstracts, 2025 IEEE 15th International Conference "Nanomaterials: Applications & Properties (IEEE NAP-2025)", 02ns-32.

Застосування моделей комп'ютерного зору до оцінки концентрації заліза у кремнієвих сонячних елементах / О. В. Завгородній, О. Я. Оліх // X Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-10. Ужгород, Україна, 26-30 травня 2025 року, с. 324.

Ultrasound and Engineering of Si/PEDOT:PSS structures / O. Olikh, D. Kalyuzhny, V. Kozachenko, S. Kondratenko // Book of Abstracts 7th International Caparica Conference in ULTRASONICS 2025, 22-26 June, Lisboa, Portugal, p. 142.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., професор, 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Боровий Микола Олександрович
(д. ф.-м. н., професор, 01.04.07)

Оліх Олег Ярославович
(д. ф.-м. н., професор, 01.04.07)

Плющай Інна Вячеславівна
(к. ф.-м. н., доцент, 01.04.13)

Чепела Леся Ігорівна
(д. філософ)

Шевченко Вікторія Богданівна
(к. ф.-м. н., доц., 01.04.07)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Катасонова Валентина Вікторівна

Телефон

+380635757925

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна