

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U031660

Державний реєстраційний номер: 0121U111939

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-05-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Аналіз відкритих і публічно доступних баз даних про структуру і властивості молекул і твердих матеріалів. Вибір об'єктів досліджень для наноструктурних прекурсорів композитів, що вирішують завдання проекту NATO SPS G5773

Початок етапу: 04.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380443908751

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, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 57.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Інженерія сучасних тугоплавких боридів для вирішення виникаючих проблем безпеки

Назва роботи англійською:

Engineering of advanced refractory borides to meet emerging security challenges

Реферат українською:

Об'єкт дослідження — композиційні матеріали на основі тугоплавких боридів. Мета роботи — розробка методики комп'ютерного конструювання оперативного створення багатофункціональних перспективних композиційних матеріалів на основі тугоплавких боридів, що здатні витримувати високі температури, енергії абляції, механічний удар, агресивні хімічні середовища, радіоактивність, тощо, для вирішення проблем безпеки. Методи досліджень — комп'ютерне моделювання. Напрацьовано методику відбору матеріалів-кандидатів з баз даних, яка полягає в наступному: 1) вибрати набір матеріалів, що включають відомі успішні зразки, без аналізу їх ознак; 2) здійснити групування за ознаками вибраного набору даних з використанням машинного навчання (кластеризацію); 3) визначити до яких кластерів даних потрапили прототипи. Відповідні кластери потенційно містять інші матеріали з необхідними набором характеристик; 4) провести аналіз ознак, за якими матеріали віднесено до певного кластера; 5) відсіяти відверто нерелевантні ознаки для покращення релевантності моделі та підвищення її упередженості в бік необхідних властивостей матеріалу; 6) застосувати модель до значно більш широкого набору матеріалів. Матеріали, які потрапляють у кластери прототипів і є перспективними матеріалами-кандидатами. Подальший відбір можна здійснювати за властивостями, що не ввійшли у набір ознак моделі, використовуючи досвід (літературу).

Реферат англійською:

The object of research is composite materials based on refractory borides. The purpose of the work is to develop computer-aided design techniques for the rapid creation of multifunctional promising composite materials based on refractory borides that can withstand high temperatures, ablation energies, mechanical impact, aggressive chemical environments, radioactivity, etc., to solve safety problems. Research methods — computer modeling. A methodology for selecting candidate materials from databases has been developed, which consists in the following: 1) select a set of materials that include known successful samples, without analyzing their features; 2) perform grouping based on the features of the selected data set using machine learning (clustering); 3) determine which data clusters the prototypes fall into. Corresponding clusters potentially contain other materials with the required set of characteristics; 4) conduct an analysis of the signs by which the materials are assigned to a certain cluster; 5) weed out frankly irrelevant features to improve the relevance of the model and increase its bias towards the necessary properties of the material; 6) apply the model to a much wider set of materials. Materials that fall into prototype clusters and are promising candidate materials. Further selection can be carried out by properties that are not included in the set of features of the model, using experience (literature).

Індекс УДК: 519.713; 519.711:53 , 53.072; 53:004

Коди тематичних рубрик: 28.17.23, 29.03.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Картузов Валерій Васильович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання: ст. наук .співр.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Інженерія сучасних тугоплавких боридів для вирішення виникаючих проблем безпеки

Назва НТП англійською: Engineering Modern Refractory Borides to Address Emerging Safety Issues

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Звіт про НДР в рамках виконання проекту NATO SPS G5773

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:

Закінчення етапу:

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. Oleksandr Vasiliev, Valerii Bekenev, Valerii Kartuzov, Egor Kartuzov Solid Solutions Zr1-xHf_xB₂ – Investigation of Properties from the First Principles/ Mach-2021 Conference, April 4-7, 2021, Baltimore, USA – [published online]

2. Muratov V.B., Karpets M.V., Garbuz V.V., Vasiliev O.O., Mazur P.V., Kartuzov V.V., Haber R. Formation of phases in B4C-Al system in a wide range of mutual concentrations/ Mach-2021 Conference, April 4-7, 2021, Baltimore, USA– [published online].

3. Vasiliev O.O, Bekenev V. L., Kartuzov V. V., Bily V. O. Mechanical properties and thermodynamics of synthesis of ZrB₂-HfB₂ solid solutions from DFT calculations/ 7th International Samsonov Conference “Materials Science of Refractory Compounds” (Book of Abstracts) – 25-27.05.2021 – Kyiv, Ukraine.–P.92.

4. Muratov V.B., Garbuz V.V., Mazur P.V., Vasiliev O.O., Khomko T.V., Kartuzov V.V., Prikhna T.O., Barvitsky P.P., Kindrachuk V. Modyfying the structure of boron carbide: new properties of AlB₁₂C₂-based ceramics/ 7th International Samsonov Conference “Materials Science of Refractory Compounds” (Book of Abstracts) – 25-27.05.2021 – Kyiv, Ukraine.–P.62.

5. Muratov V., Vasiliev O., Garbuz V., Karpets M., Mazur P., Bekenev V., Khomko T., Bily V., Kartuzov V. Modification of atomic chains in boron carbide with silicon / 7th International Materials Science Conference HighMatTech-2021 (Book of Abstracts). – 5-7 October 2021, Kyiv, Ukraine – P.65.

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Солонін Юрій Михайлович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Васільєв Олександр Олексійович

(к. х. н., 02.00.04)

Гарбуз Віктор Васильович

(к.х.н., 02.00.01)

Картузов Валерій Васильович

(к. ф.-м. н.)

Хомко Тетяна Володимирівна

(к.х.н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Єфімова Катерина Олександрівна

Телефон

+38 (050) 311-72-00

Реєстратор

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

