Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U007267

Державний реєстраційний номер: 0113U004055

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-02-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

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

Початок етапу: 02.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітного документа: Остаточний 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. Вперше проведено дослідження впливу температури і швидкості деформації на криві деформація-напруження, величину модуля Юнга для нанодротів з карбідів TiC, ZrC і сплавів TiC - ZrC. Встановлено, що с підвищенням температури модуль Юнга розглянутих об'єктів зменшується за лінійним законом. Напруження руйнування і деформація руйнування збільшуються при збільшенні відносної швидкості деформації і зменшуються при збільшенні температури. Виявлено явище перебудови структури і форми поверхні нанооб'єктів при підвищенні температури. Вперше 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. For the first time a study influence of temperature and strain rate on the stress-strain curves, Young's modulus for nanowires of carbides TiC, ZrC and TiC-ZrC alloys are carried out. It is found that Young's modulus is decreasing with increasing temperature. Stress fracture stress and strain fracture increase with increasing strain rate. The phenomenon of restructuring of the surface shape of nano objects with increasing temperature is found. For the first time 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 карбідів титану та цирконію при різних механічних впливах.

Назва НТП англійською: Software package for molecular dynamics simulation of the behavior of titanium and zirconium carbides 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 карбідів титану та цирконію, за допомогою якого проведено моделювання процесів деформації і розтягування нанодротів карбідів титану та цирконію методом молекулярної динаміки.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2014 - 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; В.В. Огородников, О.Н. Григорьев, В.Л. Бекенев, В.В. Картузов. Молекулярно-динамическое моделирование физико-механических свойств нанокристаллов карбида титана

// Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. - К.: Труды ИПМ НАНУ, 2014. - Вып. 16. С. 103-119; Огородников В. В. Компьютерное моделирование атомных механизмов деформации и разрушения тугоплавких карбидов методом молекулярной динамики // Известия Алтайского ГосУнивеоситета, 2014. - № 1/1. С. 99-102; А.А. Лисенко, В.В. Огородников, В.В. Картузов. Моделирование процесса сегментации нанокластеров Ti14C13 и Ti13C14 // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении - К.: Труды ИПМ НАНУ, 2014. - Вып. 16. С. 80-91.

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

