

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U006074

Державний реєстраційний номер: 0118U005163

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-04-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Ефекти атомного розупорядкування та їх впливи на фазову стабільність, електронну структуру та фізичні властивості сплавів Гейслера

Початок етапу: 09.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут металофізики ім Г.В. Курдюмова Національної Академії Наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: +38 044 424 1005, +38 044 424 2561

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: Кабінет Міністрів України

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 330
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ефекти атомного розупорядкування та їх впливи на фазову стабільність, електронну структуру та фізичні властивості сплавів Гейслера

Назва роботи англійською:

The atomic disordering effects and their influence on a phase stability, an electronic structure and the physical properties of the Heusler alloys

Реферат українською:

Методами спектральної еліпсометрії, магнітометрії, рентгеноструктурного аналізу та розрахунками зонної структури на основі моделі FLAPW (the full-potential linearized augmented-plane-wave) проведено дослідження просторової і електронної структури, оптичних і магнітних властивостей зразків створених нестехіометричних сплавів на основі фаз Гейслера Fe_2MnGa в їх L21 та L12- структурних типах з різними типами магнітного впорядкування. Порівняння розрахункових даних з результатами експериментальних досліджень створеного сплаву дає можливість поставити у відповідність смугам міжзонного поглинання збудження електронів між певними електронними станами у спінових підсистемах як по-, так і проти результуючої намагніченості. Виявлено, що структурні L21 до L12 (або ОЦК до ГЦК) перетворення викликають значні зміни магнітних властивостей масивних зразків. В той же час, магнітні властивості, практично, не мають впливу на оптичні властивості сплавів. За допомогою згаданих зонних розрахунків з'ясована роль взаємних атомних заміщень у формуванні енергетичних, зарядових та спінових характеристик сплавів MMnSb ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$). Встановлено, що зменшення ковалентності хімічних зв'язків і пов'язане з ним зменшення значень когезійних енергій із зростанням атомного номера M -металів в сплавах MMnSb ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$) стимулює процеси атомних розупорядкувань в них і корелює з супутнім зростанням їх питомих опорів.

Реферат англійською:

The study of spatial and electronic structure, optical and magnetic properties of the non-stoichiometric alloys Heusler Fe_2MnGa phases samples (in L21 and L12- structural types with the different types of magnetic ordering), using the methods of the spectral ellipsometry, magnetometry, X-ray diffraction analysis and the calculations of the band structure (in the FLAPW model) were carried out. Comparison of the calculated data with the results of experimental studies of the created alloys enable for us to fit the bands of interband absorption of electron excitation between certain electron states in spin subsystems both in along and in against of the resulting magnetization. Structural L21 to L12 (or bcc to fcc) transformations are found to cause the significant changes in the magnetic properties of massive samples. At the same time, the magnetic properties, in practice, have no influence on the optical properties of alloys. Using the above-mentioned zonal calculations, the role of mutual atomic substitutions in formation of energy, charge and spin characteristics of alloys MMnSb ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$) has been clarified. It was established that the decrease of the covalentness of chemical bonds and the associated decrease in the values of cohesive energies, with the growth of the atomic number of M -metals in MMnSb alloys ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$), stimulates the processes of atomic disordering in them and correlates with the associated growth of them specific resistance.

Індекс УДК: 548:537.621;538.955-405;539.21:537.621, 548:537.621;538.955-405;

Коди тематичних рубрик: 29.19.37

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Уваров Віктор Миколайович

Науковий ступінь: д. ф. -м. н.

Вчене звання: професор, член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Результати дослідження структурних перетворень у деяких сплавах Гойслера. Визначення структурних, оптичних, магнітних властивостей та особливостей електронної структури створених нестехіометричних сплавів Гойслера Fe_2MnGa з різним типом магнітного впорядкування; теоретичні дослідження факторів стабільності характеристик сплавів Гойслера MMnSb ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$). Для можливого використання у спінтроніці, наноелектроніці, машинобудуванні, медицині тощо.

Назва НТП англійською: Results of the structural transformation study in some Heusler alloys. The determination of the structural, optical, magnetic properties and the electronic structure features of the non-stoichiometric Heusler Fe_2MnGa alloys with the different types of magnetic ordering; the theoretical investigations of the stability factors of the Heusler alloys MMnSb ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$) characteristics. For a possible using in spintronics, nanoelectronics, engineering, medicine, etc.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Дослідження та експериментальні розроблення в галузі природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методами спектральної еліпсометрії, магнітометрії, рентгеноструктурного аналізу та розрахунками зонної структури на основі моделі FLAPW (the full-potential linearized augmented-plane-wave) проведено дослідження просторової і електронної структури, оптичних і магнітних властивостей зразків створених нестехіометричних сплавів на основі фаз Гойслера Fe_2MnGa в їх L21 та L12- структурних типах з різними типами магнітного впорядкування. Порівняння розрахункових даних з результатами експериментальних досліджень створеного сплаву дає можливість поставити у відповідність смугам міжзонного поглинання збудження електронів між певними електронними станами у спінових підсистемах як по-, так і проти результуючої намагніченості. Виявлено, що структурні L21 до L12 (або ОЦК до ГЦК) перетворення викликають значні зміни магнітних властивостей масивних зразків. В той же час, магнітні властивості, практично, не мають впливу на оптичні властивості сплавів. За допомогою згаданих зонних розрахунків з'ясована роль взаємних ат

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: визначає Президія НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Фундаментальна наука, медицина, спінтроніка, хімічна промисловість, машинобудування тощо.

Перспективні ринки: 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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Татаренко Валентин Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Клімов Володимир Вікторович

Кудрявцев Юрій Володимирович

Мельник Максим Петрович

Немошкаленко Марина Володимірівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

