

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U007098

Державний реєстраційний номер: 0116U004142

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Моделювання електронної структури, властивостей матеріалів та розробка їх інформаційних моделей

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (032)2582025, (032)2582680

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221, 380444814763

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 270.2
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання та синтезування нових багатокомпонентних функціональних матеріалів з прогнозованою структурою та властивостями

Назва роботи англійською:

Modeling and synthesis of new multicomponent functional materials with predictable structure and properties

Реферат українською:

Змодельовано електронну структуру, властивості матеріалів та розроблено їх інформаційні моделі – побудовано архітектуру контролера нечіткої логіки. Проведено квантовохімічне моделювання утворення нановключень інтерметалідних фаз у матричних фазах типу TiNiSn, ZrNiSn, HfNiSn. Встановлено закономірності впливу різного роду домішок імплементованих в певні кристалографічні позиції тернарних сполук. Використано методики кристалічної інженерії для моделювання електронної будови фаз, розташованих по границях зерен синтезованих матеріалів. Проаналізовано фрагментацію структури в результаті значної пластичної деформації поверхні спеціальних сплавів імпульсами нано-фемтосекундного лазерного випромінювання за допомогою методів нечіткої логіки.

Реферат англійською:

Simulation of electronic structure, properties of materials and their information models were developed - the architecture of the fuzzy logic controller was constructed. The quantum-chemical simulation of the formation of nanowells of intermetallic phases in matrix phases of type TiNiSn, ZrNiSn, HfNiSn was carried out. The regularities of the influence of various impurities that are implemented in certain crystallographic positions of ternary compounds are established. The methods of crystalline engineering for modeling the electronic structure of the phases located along the boundaries of the grains of the synthesized materials have been used. The fragmentation of the structure as a result of significant plastic deformation of the surface of special alloys by impulses of nanofemtosecond laser radiation by means of fuzzy logic methods is analyzed.⁵⁴⁸¹

Індекс УДК: 669.017:53, 669:621.039.6

Коди тематичних рубрик: 53.49.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Дусягіна Зоя Антонівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Моделі кристалічної та електронної структури багатокомпонентних матеріалів

Назва НТП англійською: Models of crystalline and electronic structure of multicomponent materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 28.51/0 Укрзалізниця, підприємства енергетики і теплоенергетики, приладобудування і машинобудування, ВУЗи.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Оптимізована модель структури нового термоелектричного матеріалу, що є перспективним для застосування їх в різноманітних термоелектричних пристроях

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 3 роки

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: галузеві науково-дослідні інститути та підприємства аерокосмічної, енергетичної та транспортної галузей

Перспективні ринки: України, Європи

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 15000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 18000

Очікуваний термін окупності (років): 3

Додаткова інформація: за договорами

IX. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Чухрай Наталія Іванівна

Перелік осіб-виконавців

Букова Марія Романівна

Ваврух Валентина Іванівна

Дурягіна Зоя Антонівна

Ковбасюк Тарас Михайлович

Кулик Володимир Володимирович

Лемішка Ігор Анатолійович

Пілат Михайло Володимирович

Ромака Віталій Володимирович

Тепла Тетяна Леонідівна

Ткаченко Роман Олексійович

Тростянчин Андрій Миколайович

Шевчук Віра Григорівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

