

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000584

Державний реєстраційний номер: 0121U113567

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2024

## II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

**Назва етапу:** Розроблення числової моделі інтенсивності випромінювання з Темних віків і Космічного світанку, математичної моделі росту корозійно-втомних коротких тріщин, синтез нових об'ємних, нанорозмірних та композитних функціональних матеріалів, нових інтерметалічних сполук, дослідження водневої системи осадового басейну, особливості функціонування флювіальних процесів різнопорядкових річок

**Початок етапу:** 04.2023

**Закінчення етапу:** 12.2023

**Вид звітнього документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380322616048

## 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:** проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Кабінет Міністрів України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380444813221

## 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:** 2.7 - інше

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201390

<b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 4713.800
---

## **VII. Відомості про ДіР**

### **Назва роботи українською:**

Нові речовини, матеріали, види матерії та підходи до енергозбереження та охорони довкілля

### **Назва роботи англійською:**

New substances, materials, types of matter and approaches to energy saving and environmental protection

### **Реферат українською:**

Створено числові моделі для розрахунку спектральної густини випромінювання протогалактик (гало) Темних віків і Космічного світанку в космологічних моделях з темною матерією, темною енергією, первісним магнітним полем та світлом перших об'єктів. Розроблено розрахункову модель для визначення залишкового ресурсу елементів конструкцій з короткими тріщинами за дії циклічного навантаження і корозивного середовища. Синтезовано боратні стекла, активовані іонами лантанідів, які мають великий потенціал застосування для створення білих світлодіодів. З'ясовано механізми релаксації електронних збуджень та природа екситонних станів в об'ємних та нанорозмірних кристалах CeF<sub>3</sub>. Виходячи з першопринципних розрахунків в межах теорії функціоналу електронної густини оцінено вплив домішок на електронну структуру та фізичні властивості наноструктур на основі ZnO та їхнього потенційного застосування в наноелектронних і спінтронних приладах. Спрогнозовано та синтезовано нові неописані раніше органічні флуорофори на основі гетероциклічних сполук, придатні до конструювання OLED-пристроїв. Синтезовано нові інтерметалічні сполуки, встановлено фазові рівноваги, побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану, визначено кількісні характеристики хімічних і фізичних властивостей сполук для вибору хімічних складів, що відповідають оптимальним структурним, електрокінетичним, магнітним та термоелектричним властивостям. Встановлено розподіл потоків водню через ґрунтовий шар в межах осадових басейнів Західного нафтогазоносного регіону. Розроблено концепції міграції природнього водню в осадових басейнах та методики картування витоків водню за варіаціями складу ґрунтового газу. З'ясовано особливості флювіального рельєфу та розвитку флювіальних процесів ключової ділянки у районах впливу вузлів злиття різнопорядкових водотоків у басейні річки Сукіль у межах Скибових Карпат та оцінено їхню роль у функціонуванні річкових систем в умовах змін клімату та антропопресії на геосередовище.

### **Реферат англійською:**

Numerical models were created to calculate the spectral density of protogalaxie radiation of the Dark Ages and the Cosmic Dawn in cosmological models with dark matter, dark energy, the primordial magnetic field, and the light of the first objects. A model was developed to determine the residual life of structural elements with short cracks under the action of cyclic strain and a corrosive environment. Borate glasses activated by lanthanide ions were synthesized for white LEDs. The relaxation mechanisms of electronic excitations and the nature of exciton states in bulk and nanoscale CeF<sub>3</sub> crystals were estimated. Based on first-principle calculations within the electron DFT, the effect of impurities on the electronic structure and physical properties of ZnO-based nanostructures and their potential application in nanoelectronic and spintronic devices was assessed. New organic fluorophores based on heterocyclic compounds, suitable for the construction of OLED devices, were predicted and synthesized. New intermetallic compounds were synthesized, phase equilibria were established, isothermal sections of state diagrams were constructed, quantitative characteristics of chemical and physical properties of compounds were determined for chemical compositions corresponding to optimal structural, electrokinetic, magnetic and thermoelectric properties. The distribution of hydrogen flows through the soil layer within the sedimentary basins of the Western oil and gas region was established. Concepts of natural hydrogen migration in sedimentary basins and methods of hydrogen leakage mapping based on soil gas composition variations were developed. The unique characteristics of the fluvial terrain and processes in a pivotal zone affected by various river confluences in the Sukil River basin within the Skole Beskids have been identified. Their role in river system function amid climate

change and human impact on the environment has been assessed.

**Індекс УДК:** 621.318.1, 666.265; 621.387.464, 669:66-963, 621.351/.355, 620.193:669; 620.193:669.018.8, 550.3:504 , 550.8:553.3/.9 , 524.6

**Коди тематичних рубрик:** 45.09.29, 47.09.43, 53.41.43, 61.13.27.19, 81.33.07, 37.01.94, 38.57, 41.27.25

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Волошиновський Анатолій Степанович

**Науковий ступінь:** д. ф.-м. н.

**Наукове звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Нові речовини, матеріали, види матерії та підходи до енергозбереження та охорони довкілля

**Назва НТП англійською:** New substances, materials, types of matter and approaches to energy saving and environmental protection

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Технології, Матеріали, Методи, теорії

**Галузь застосування:** фізичне та хімічне матеріалознавство, пошук родовищ корисних копалин, радіоастрономія, охорона довкілля

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розроблено комп'ютерні програми для числового інтегрування системи рівнянь кінетики формування/руйнування перших молекул, іонізації/рекомбінації гідрогену і гелію, енергетичного балансу та рівнянь кінетики заселеностей найнижчих енергетичних рівнів атомарного гідрогену та перших молекул в епоху Темних віків і Космічного світанку при заданих моделях енергетичного розподілу випромінювання перших джерел світла. Отримано усереднені по небу інтенсивності радіовипромінювання в лініях перших молекул та в лінії надтонкої структури атомарного гідрогену у різних космологічних моделях. Побудовано ефективну математичну модель для визначення залишкового ресурсу тонкостінних елементів конструкцій з короткими тріщинами за дії циклічного навантаження і корозивного середовища. Синтезовано нові літій-боратні стекла, леговані іонами лантанідів, які демонструють люмінесцентні параметри, придатні для створення білих світлодіодів. З'ясовано вплив розмірних ефектів на міграцію електронних збуджень в об'ємних та нанорозмірних кристалах  $\text{CeF}_3$ . Оцінено вплив домішок на електронну структуру та фізичні властивості наноструктур на основі  $\text{ZnO}$ . Запропоновано модель нейронної мережі для апроксимації потенціалів міжатомної взаємодії багатоатомних систем. Розроблено ефективні та ресурсощадні методи та отримано нові органічні люмінесцентні матеріали з ефектами термоактивованої уповільненої флуоресценції та механолюмінесценції. Отримані матеріали застосовано для створення OLED пристроїв. Синтезовано нові сполуки на основі інтерметалідів для хімічних джерел електричної енергії, термоелементів, постійних магнітів, конструкційних і захисних елементів. З'ясовано параметри міграції та акумуляції водню в різних типах ґрунтів та в залежності від їх рівня вологості. Виявлено аномальні зони із високою концентрацією водню. Дано прогнозу оцінку впливу змін клімату та зростаючої антропопресії на функціонування басейнових систем, у тім числі формуванні локальних повеней і паводків.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:**

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** НВП «Електрон-Карат» (м. Львів), Інститут сциниляційних матеріалів НАН України (м. Харків)

## **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**

Novosyadlyj B. Formation of the hydrogen line 21-cm in Dark Ages and Cosmic Dawn: dependences on cosmology and first light / Novosyadlyj B. Novosyadlyj, Yu. Kulinich, G. Milinevsky, V. Shulga // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 2023. – Vol. 526. – P. 2724–2735.

Новосядлий Б. Сигнал в лінії надтонкої структури основного стану гідрогену з епохи Темних віків як космологічний тест / Б. Новосядлий, Ю. Кулініч, О. Коноваленко // Журн. фіз. досл. – 2023 (прийнята до друку, грудень 2023).

Коноваленко О. Про можливість детектування глобального сигналу в лінії надтонкої структури основного стану гідрогену з епохи Темних віків / О. Коноваленко, В. Захаренко, Б. Новосядлий // Журн. фіз. досл. – 2023 (прийнята до друку, грудень 2023).

Acharyya A. Sensitivity of the Cherenkov Telescope Array to TeV photon emission from the Large Magellanic Cloud / A. Acharyya, B. Novosyadlyj, O. Petrucek et al. // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 2023. – V.523. – P. 5353–5387.

Acharyya A. Sensitivity of the Cherenkov Telescope Array to TeV photon emission from the Large Magellanic Cloud / A. Acharyya, B. Novosyadlyj, O. Petrucek, I. Sushch et al. // Astroparticle Physics – 2023. – V. 150. – P. 102850.

Андрейків О.Є. Визначення залишкової довговічності пластини зі системою тріщин за дії довготривалого статичного навантаження і корозивного середовища / О.Є. Андрейків, І.Я. Долінська, Н.С. Звягін, М.О. Любчак // Фізико-хімічна механіка матеріалів. – 2023. – № 5. – С. 61–67.

Stankevych V.Z. Analysis of 3D problems of dynamic loading of elastic piecewise-homogeneous bodies with internal cracks / V.Z. Stankevych // Journal of Mathematical Sciences. – 2023. □ 274, No. 5. □ P. 641–659.

Przystupa K. The Influence of Halide Ion Substitution on Energy Structure and Influence of Halide Ion Substitution on Energy Structure and Luminescence Efficiency in CeBr<sub>2</sub>I and CeBr<sub>2</sub> Crystals / K. Przystupa, Ya.

Chornodolskyy, Ja. Selech, V. Karanushenko, T. Demkiv, O. Kochan, S. Syrotyuk, A. Voloshinovskii / Materials. – 2023. – V. 16, № 14. – P. 5085.

Chornodolskyy Ya. M. Energy structure of CeCl<sub>2</sub>Br and CeClBr<sub>2</sub> crystals / Ya. M. Chornodolskyy, V. O.

Karanushenko, S. V. Syrotyuk, L. D. Bolibrukh, S. O. Ihnatsevych, O. T. Antonyak, A. S. Voloshinovskii // J. of Phys. Stud. – 2023. – V.27, № 3. – P. 3702.

Moroz M. Optimizing Neural Network Wavefunctions Using Variational Monte Carlo with Evolution Strategies / M. Moroz, O. Bovgyra // 2023 IEEE 13th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT). – 2023. – P. 43–46.

B. Mahlovanyi, M. Truax, A. Luchechko, Y. Shpotyuk, G. Yang, R. Golovchak, A. Kovalskiy, J. Cebulski. Optical properties and tunable luminescence of Ce<sup>3+</sup>/Dy<sup>3+</sup> doped lithium borate glasses for photonic applications // Journal of Luminescence. – 2023. – 263. – P. 120120.

Pokhodylo N.T. The Synthesis of Novel 7-(Substituted benzyl)-4,5-dihydro [1,2,3] triazolo [1,5-a] pyrazin-6 (7H)-ones via Tandem Ugi–Huisgen Reactions / N. T. Pokhodylo, M. A. Turychak, E. A. Goresnik, M. D. Obushak // Synthesis. – 2023. – Vol. 55, №6. – P. 977–988.

Бутенко С. Молекулярний дизайн та синтез карбазол/хромен-4-онів, поєднаних через феніленовий л-спейсер / С. Бутенко, М. Станіцька, Х. Піткович, І. Єфімов, М. Аксьонова, В. Кальмук, О. Скрипська, В. Соловійов, Ю. Горак, Р. Литвин // Вісник Львівського університету. Серія хімічна. – 2023. – 64. – С. 239–248.

Romaka V. V. Modeling of the properties of the semiconductor solid solution Lu<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub>NiSb in the presence of magnetic ordering / V.V. Romaka, V.A. Romaka, Yu. Stadnyk, L. Romaka, A. Horyn, V. Pashkevych, P. Haraniuk // Phys. Chem. Solid State. – 2023. – Vol. 24, No. 3. – P. 503–508.

Стадник Ю. Дослідження властивостей напівпровідника n-TiNiSn, легованого донорною домішкою Nb / Ю. Стадник, Л. Ромака, А. Горинь, В. Ромака, П. Демченко, В. Пашкевич, П. Гаранюк // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. – 2023. – Вип. 64. – С. 120–127.

Нитка В. Електрохімічне гідрування сплавів на основі Tb<sub>2</sub>Ni<sub>7</sub>, легованих літієм та магнієм / В. Нитка, В. Кордан, І. Тарасюк, В. Павлюк // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. – 2023. – Вип. 64. – С. 136–146.

Rybak, N. Antropogenic influence on the functioning of the Sukil riverbed / N. Rybak, L. Dubis // Проблеми геоморфології і палеогеографії Українських Карпат і прилеглих територій. – 2022. – Вип. 1 (14). – С. 147–159.

Віхоть Ю. М. Цифрове геологічне картування та аналіз польових геоданих інструментами та плагінами QGIS. / Ю. М. Віхоть, І. М. Бубняк, С. Я. Кріль // Наукові праці ДонНТУ. Серія Гірничо-геологічна. – 2022. – №1(27) – 2(28). – С. 122–135.

Віхоть Ю. М. Особливості традиційного та цифрового геокартування під час польових досліджень та проведення практик у Карпатах / Ю. М. Віхоть, С. Я. Кріль // Проблеми геології України : збірник наукових праць / Відп. ред. М. М. Павлунь. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2023. – С. 59–61.

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Мельник Володимир Петрович

д. філ. н.

### **Перелік осіб-виконавців**

Іваськевич Оксана Ярославівна

Андрейків Олександр Євгенович

(д. т. н., 01.02.04)

Бовгира Олег Вікторович

(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Васильців Вячеслав Іванович

(к. ф.-м. н.)

Віхоть Юрій Михайлович

(к. геол. н.)

Гамерник Роман Васильович

(к. ф.-м. н.)

Глосковська Наталія Вікторівна

(к. ф.-м. н.)

Горинь Андрій Маркіянович

(к. х. н., 02.00.01, 102)

Гуран Ігор Йосипович

(к. ф.-м. н., 01.01.04)

Демків Тарас Михайлович

(д. ф.-м. н., 01.04.10)

Дубіс Лідія Францівна

(д. геогр. н., 11.00.04)

Коваленко Марія Василівна

(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Костюк Олександр Володимирович

(к. геол. н.)

Кузь Ігор Степанович

(к. ф.-м. н.)

Кулик Юрій Орестович

(к. ф.-м. н., 01.04.13)

Кулініч Юрій Анатолійович

(к. ф.-м. н., 01.03.02)

Литвин Роман Зіновійович

(к. х. н.)

Новосядлий Богдан Степанович

(д. ф.-м. н., 01.03.02)

Обушак Микола Дмитрович

(д.х.н., 02.00.03)

Павлик Богдан Васильович  
(д.ф.-м.н., 01.04.10)

Павлюк Володимир Васильович  
(д.х.н., 02.00.01)

Присяжний Андрій Григорович  
(к. т. н., 05.03.05)

Рибак Назар Б.

Словотенко Надія Олександрівна  
(к.геол.н.)

Станкевич Володимир Зенонович  
(д. ф.-м. н., 01.02.04)

Тарасюк Іван Іванович  
(к. х. н.)

Шпотюк Ярослав Олегович  
(к. ф.-м. н.)

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

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

Малий Т.С.

+38 (063) 962-59-72

