

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U003543

Державний реєстраційний номер: 0108U004137

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Транспортні електронні властивості некристалічних подвійних та потрійних сплавів алюмінію з 3d-перехідними металами

Початок етапу: 01.2008

Закінчення етапу: 12.2009

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:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (032) 272-70-40

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 75.123

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Транспортні електронні властивості некристалічних подвійних та потрійних сплавів алюмінію з 3d-перехідними металами

Назва роботи англійською:

The electron transport properties of non-crystalline binary and ternary alloys of aluminium with 3d-transition metals

Реферат українською:

Досліджено і розроблено методики вирішення таких проблем, як отримання аналітичних виразів та розробка процедури чисельного розрахунку міжатомних кореляційних функцій неупорядкованих металічних сплавів з можливістю врахування полідисперсної природи розмірів частинок та наявності хімічного впорядкування компонент. Здійснено узагальнення методу на випадок рідкої суміші полідисперсних кристалічних наночастинок у металічному розплаві. Апробовано наближення усередненої реплікованої T-матриці отриманого на основі формули Ллойда при розрахунках густини станів багатокомпонентних металічних розплавів з незаповненими d-зонами. Проведено розрахунок електронної структури бінарних сплавів у системах Al-Fe, Al-Ni, Al-Cr, Al-Ti. Запропоновано методики розрахунку електропровідності та термо-е.р.с. таких сплавів. Проведено аналіз умов утворення хімічно впорядкованих підсистем в сплавах на основі алюмінію

Реферат англійською:

The techniques of analytic solution and numerical computation are studied and solved for the problem of derivation of interatomic correlation functions in disordered metallic melts including the cases of component size-polydispersity and chemical ordering. The method is generalized to the liquid mixture of polydisperse hard-spheres. Also the average replicated T-matrix approximation based on Lloyd formula is successfully tested for instance of electronic density of states in multicomponent metallic melts with 3d-transition elements. Numerical calculation of electronic structure of binary alloys Al-Fe, Al-Ni, Al-Cr and Al-Ti are presented. Some techniques for calculation of electroconductivity and thermopower are suggested. The conditions of chemical-ordering are analyzed for the alloys based on aluminium.

Індекс УДК: 539.216;539.22;538.91-405;548;620.18, 539.2.546; 669-405.01

Коди тематичних рубрик: 29.19.04

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Якібчук Петро Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Алгоритм автоматизованого прогнозування транспортних властивостей некристалічних подвійних та потрійних металічних сплавах з 3d-перехідними елементами

Назва НТП англійською: The algorithm for prediction of the transport properties of non-crystalline binary and ternary metallic alloys containing 3d-transition elements

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створена полідисперсна модель міжатомних кореляцій у багатокомпонентних металічних розплавах та перехід від атермічності моделі до залежної від температури поведінки реальних систем з врахуванням еластичності парної міжчастинкової взаємодії. Отримано наближення середньої реплікованої Т-матриці для густини електронних станів у зоні провідності металічного розплаву. Узагальнено систему рівнянь Орнштайна-Церніке на випадок усередненої Т-матриці розсіяння електрона у системі іонів металічного розплаву та умова замикання для такої системи рівнянь;. Отримано низку даних дослідження поведінки та взаємозв'язку атомної структури та електронної структури багатокомпонентних металічних розплавів, зокрема систем Al-Ni-Fe.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2010-2011

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НВП "Карат"

Перспективні ринки: Україна

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. Yakibchuk P. M. A polydisperse hard sphere model for interatomic correlations in metallic melts / P. M. Yakibchuk, O. V. Volkov, S. O. Vakarchuk // Ukr. Jour. Phys., - 2009, - Vol.54, - №11, - P.1102-1107. 2. Yakibchuk P. M. A polydisperse hard sphere model for interatomic correlations in multicomponent metallic melts / P. M. Yakibchuk, O. V. Volkov, S. O. Vakarchuk // American Inst. Phys. Conf. Proc., - 2009, - Vol.1198 - P. 216-2255.

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Височанський Василь Степанович

Перелік осіб-виконавців

Вакарчук С. О.

Волков О. В.

Добрянська Л. О.

Карлюк Л. Т.

Якимович А. С.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

