

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0220U101281

**Державний реєстраційний номер:** 0117U003923

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 07-02-2020

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 3

**Назва етапу:** Побудова кривих навантаження для  $Tin+1Cn$  та металевих наноструктур при різних видах деформації.

**Початок етапу:** 01.2019

**Закінчення етапу:** 12.2019

**Вид звітнього документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Сумський державний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 05408289

**Місцезнаходження:** вул. Римського-Корсакова 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, Україна

**Форма власності:**

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

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380542334058

## 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

## 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

|                                                        |
|--------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 581.3 |
|--------------------------------------------------------|

## **VII. Відомості про ДіР**

### **Назва роботи українською:**

Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих наночастинок

### **Назва роботи англійською:**

Physical properties of the two-dimensional nanomaterials and metallic nanoparticles

### **Реферат українською:**

Розроблено комп'ютерні схеми, для чисельного моделювання процесів деформації двовимірних карбідів титану та металевих наночастинок в рамках методів класичної молекулярної динаміки. Запропонована комп'ютерна модель дозволяє досліджувати механічні параметри металевих наноструктур під час деформації розтягування та стискання, а також двовимірних карбідів титану під час індентування абсолютно жорстким індентером. Реалізовано алгоритм взаємодії наноламінату  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  з абсолютно жорстким індентером що дозволило проаналізувати можливість отримання зразків двовимірних карбідів титану  $\text{Ti}_2\text{C}$ . Проведено моделювання процесів деформації розтягування та стискання металевих наноструктур та процесів індентування зразків  $\text{Ti}_{n+1}\text{C}_n$  під час якого були розраховані криві навантаження, механічні параметри та атомістичні конфігурації досліджуваних зразків.

### **Реферат англійською:**

Computer algorithms for simulation of deformation processes of two-dimensional titanium carbides and metallic nanoparticles by molecular dynamics methods were developed. Proposed model allows to investigate mechanical properties of the metallic nanorods under tension and compression as well as the two-dimensional titanium carbides during the indentation. Within developed model, the deformation of mentioned samples was simulated, and load curves were calculated. Also algorithm for interaction of  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  nanolaminate with rigid indenter also was developed. Within developed scheme the possibility of mechanical exfoliation of  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  with formation of  $\text{Ti}_2\text{C}$  flake was investigated.

**Індекс УДК:** 539.1.08, 539

**Коди тематичних рубрик:** 29.15.39

### **Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Борисюк Вадим Миколайович

**Науковий ступінь:** к. ф.-м. н.

**Вчене звання:**

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Комп'ютерний алгоритм для моделювання процесів деформації металевих нанодротів методами класичної молекулярної динаміки. Алгоритми моделювання взаємодії двовимірних карбідів титану  $Ti_{n+1}C_n$  з  $n=1, 2$  і  $3$  та наноламінату  $Ti_2AlC$  з абсолютно жорстким індентером. Розраховані криві навантаження та атомістичні конфігурації.

**Назва НТП англійською:** Computer algorithm for simulation of deformation process of metallic nanorods by molecular dynamics methods. Algorithms for simulation of interaction of two-dimensional titanium carbides  $Ti_{n+1}C_n$  with  $n=1, 2$  і  $3$  and nanolaminate  $Ti_2AlC$  with rigid indenter. Calculated load curves and atomistic configurations.

**НТП, яку передбачалося створити:**

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

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** 73.1

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Були розроблені комп'ютерні алгоритми та програмні коди для моделювання процесу індентування  $Ti_{n+1}C_n$  зразків з метою дослідження їх механічних властивостей та можливості отримання двовимірних карбідів титану шляхом механічного розшарування сполуки  $AlTi_2C$ . А також розроблені числові схеми для моделювання металевих нанодротів зі структурою ядро - оболонка (англ. core@shell) при деформаціях розтягнення та стискання. По результатам комп'ютерного моделювання для зразків біметалевих нанодротів  $Ag@Pd, Au@Pd, Pd@Ag$  і  $Pd@Pt$  зі структурою ядро - оболонка побудовані криві навантаження придеформаціях розтягнення та стискання. Шляхом інтерполяції лінійних ділянок отриманих залежностей розраховані модулі пружності досліджуваних зразків. Проведено моделювання процесів індентування зразків двовимірних карбідів титану  $Ti_{n+1}C_n$  з абсолютно жорстким індентером при різних параметрах взаємодії зі зразком. Для зазначених матеріалів розраховано криві навантаження та значення ефективних механічних параметрів. Проведено моделювання взаємодії трикомпонентної сполуки  $AlTi_2C$  з абсолютно жорстким індентером. Знайдені значення параметрів взаємодії при яких спостерігається механічне розшарування вихідного зразка з утворенням фрагменту двовимірного карбиду  $Ti_2C$

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Підвищення продуктивності праці

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 01.2019

**Закінчення етапу:** 12.2019

**Споживачі продукції:** Сумський державний університет та інші ВНЗ

**Перспективні ринки:** України

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обґрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## **IX. Бібліографічний опис**

Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science: 1. Vadym Borysiuk, Vadym N. Mochalin, Thermal stability of two-dimensional titanium carbides  $Ti_{n+1}C_n$  (MXenes) from classical molecular dynamics // MRS Communications. - 2019. -V. 9. - P. 203-208.

2. Ya. O. Kravchenko, I. Iatsunskyi, O.V. Maksakova, B. V. Natalich, A. V. Dvornichenko, A. D. Pogrebnjak, V. N. Borysiuk, Experimental and Numerical Study of Multicomponent Nitride Coatings Based on  $TiAlSiY$  fabricated by CA-PVD method // Materials Research Express. - 2019. -V. 6(6)- P. 066406.

3. U. Shvets, B. Natalich, V. Borysiuk, Elastic Properties of Au, Ag, and Core-shell  $Au@Ag$  Nanorods from Molecular Dynamics Simulations // Journal of nano- and electronic physics. - 2019. -V. 11, №4. - P. 04026(5pp).

4. Lyashenko I. A. and Popov V. L., Transition between Regimes of Adhesion and Sliding Friction in Contacts of Axially Symmetric Bodies // Friction and wear. - 2019. -V. 40, №1. - P. 52-61.

5. I. A. Lyashenko, V. N. Borysiuk, V. L. Popov, Dynamical model of asymmetric actuator of directional motion // Meccanica. - 2019. -V. 54. - P. 1681-1687.

6. Lyashenko I. A. and Popov V. L., Theoretical Estimation of The Influence of Plastic Deformation on Average Coefficient of Friction in the Process of Nanostructuring Burnishing of Metal Samples // Friction and wear. - 2019. -V. 40, №5. - P. 504-515.

## **Х. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Васильєв Анатолій Васильович

К. Т. Н.

### **Перелік осіб-виконавців**

Захарова Діана Сергіївна

Кравченко Ярослав Олегович

Ляшенко Зінаїда Миколаївна

(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Ляшенко Яків Олександрович

(д. ф.-м. н.)

Максакова Ольга Василівна

Могильних Марія Андріївна

Наталіч Богдан Владиславович

Харченко Василь Олегович

(д. ф.-м. н., 01.04.02)

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Максюта Л.Ю.

**Телефон**

+38 (054) 233-41-08

**Реєстратор**

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

