

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U004575

Державний реєстраційний номер: 0115U004276

Відкрита

Дата реєстрації: 09-09-2019



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Фізико-математичне моделювання.

Початок етапу: 06-2015

Закінчення етапу: 06-2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Запорізький національний університет

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02125243

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 69600, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 66

Телефон: (061) 764 45 46

E-mail: sekr@znu.edu.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Запорізький національний університет

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02125243

Адреса: вул. Жуковського, 66, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69600, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380612287508

E-mail: znu@znu.edu.ua

WWW: <https://www.znu.edu.ua/>

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

КПКВК: 2201040

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання

ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 0 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання умов формування і стабільності металевих субнано- і нанокластерів з домішковими атомами впровадження і заміщення.

Назва роботи (англ)

Simulation the conditions of formation and stability of the metallic subnano- and nanoclusters which containing the interstitial and substitutional atoms.

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – нанокластер заліза, що містить атом вуглецю як домішку впровадження та атом чи атоми нікелю, як домішки заміщення. 1) Розроблено і апробовано модель ГЦК подібного нанокластеру системи залізо-нікель-вуглець, що описує поведінку атомів заміщення (нікелю) та впровадження (вуглецю) та визначено їхній вплив на умови стабільного існування і зростання нанокластера для формування нової фази. 2) Визначено шляхи дрейфу атому вуглецю до поверхні і вплив положення атомів нікелю на можливість маніпулювання атомом вуглецю в нанометрових кластерах та в поверхневих шарах фази, що формується. 3) Визначено вплив положення атому вуглецю на напрямки зростання нанокластеру заліза. 4) Розроблено модель ОЦК подібного нанокластеру на основі заліза та визначено енергетично вигідні позиції октаедричних та тетраедричних міжвузлів, які може займати атом вуглецю при його дрейфі на поверхню. 5) Визначено вплив атомів заміщення різного сорту на енергію нанокластера на основі заліза. 6) Визначено можливу динаміку зростання ГЦК та ОЦК нанокластерів заліза з формуванням поверхневих шарів насичених та збіднених вуглецем.

Реферат (англ)

The object of study is an iron nanocluster which containing a carbon atom as an interstitial impurity and nickel atom or atoms as substitutional impurities. 1) A model of an FCC-similar iron-nickel-carbon nanocluster was developed and tested, describing the behavior of substitution (nickel) atoms and interstitial (carbon) atom in iron nanoclusters, and their influence on the conditions of stable existence and growth of the nanocluster during new phase formation. 2) It was determined the carbon atoms' drift ways to the surface, as well as the influence of the nickel atoms position for the given possibility for the carbon atom manipulation in such nanoclusters and at the surface layers of the formed phase. 3) The influence of carbon atom position on the growth directions of the iron nanocluster was determined. 4) The model of BCC-similar nanocluster iron-based has developed that determinate of the energy-favorable octahedral and tetrahedral interstices positions for the carbon atom at the drift to the surface. 5) The influence of substitution atoms of different types on the energy of the nanocluster based on iron was determined. 6) The dynamic of the FCC and BCC iron nanoclusters growth had been estimated in the surface layers during the carbon saturating and depleting.

Індекс УДК: 544.27, 620.3:66.D11:544.272

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15.21.07

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Моделювання умов формування і стабільності металевих субнано- і нанокластерів з домішковими атомами впровадження і заміщення

Назва продукції (англ): Simulation the conditions of formation and stability of the metallic subnano- and nanoclusters which containing the interstitial and substitutional atoms.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Нанофізика, нанохімія, наноматеріали

Опис продукції (укр): Розроблено шляхом моделювання методи 1) впливу на напрям дрейфу атомів впровадження, за допомогою зміни позиції на поверхні атому заміщення для нанокластерів та наносистем; 2) маніпуляції атомом впровадження за допомогою атома заміщення, позиція якого визначає розмір потенційного бар'єру для дрейфуючого атому; 3) регулювання зростання нанокластеру заліза за допомогою атому впровадження; 4) регулювання рівню насичення поверхневого шару наноплівки або нанокластеру атомами впровадження.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: -

Споживачі продукції: -

Перспективні ринки: -

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Nedolya A. V., Bondarenko N. V. Change of Energy of the Cubic Subnanocluster of Iron Under Influence of Interstitial and Substitutional Atoms. *Nanoscale Research Lettes*. 2016. 11:15. DOI: 10.1186/s11671-016-1239-6 2. Nedolya A.V. Conditions of Spontaneous Growth of Iron Subnanocluster: The Influence of Impurity Atoms. *Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications*. Springer Proceeding in Physics 183, edit. O. Fesenko, L. Yatsenko, Springer International Publishing Switzerland 2016, Chapter 20, p. 231-245 3. Bondarenko N. V., Nedolya A. V. Energy of the Isolated Metastable Iron-Nickel FCC Nanocluster with a Carbon Atom in the Tetragonal Interslice. *Nanoscale Research Lettes*. 2017. 12:139. DOI 10.1186/s11671-017-1919-x 4. Nedolya A. V., Bondarenko N. V. On the possibility to control an atom motion in a FCC iron nanocluster. *Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications*. Selected Proceeding of the 4th International Conference Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2016). Edits: O.Fesenko, L. Yatsenko. Springer Proceeding in Physics 195. Chapter 20, 2017. P. 395-404. 5. Bondarenko N. V., Nedolya A. V. On the Possibility to Control an Atom Motion in a FCC Iron Nanocluster. *Acta Physica Polonica A*. 2018. 133, 4. P. 277-279. 6. Bondarenko N. V., Nedolya A. V. The Estimation of Stability and Growth of F.C.C. Iron Nanocluster Containing the Impurity Atoms. *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*. 2018. т. 40, № 12, С. 1675-1687. DOI: 10.15407/mfint.40.12.1675 7. Bondarenko N. V., Nedolya A. V. The Impurity Effect at the Cubic Iron Nanocluster Growth. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2018. 661(1), P. 45-51. 8. Nedolya A.V., Bondarenko N.V. Calculation of the specific energy change in an iron-based BCC nanocluster. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2018. 764(1). P. 59-68. 9. Eppe, M., Prylutskyy, Y., Nedolya, A.V., Shapar, D.Y. Estimation of energy of cubic iron-carbon nanoclusters by molecular mechanic method. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. 2016. 47 (2-3). P. 128-132.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 96

Мова звіту: Українська

Умови поширення в Україні: Не заборонено

Умови передачі іншим країнам: Не заборонено

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Бондаренко Наталя Валеріївна

Недоля Анатолій Васильович

Керівник організації:

Фролов Микола Олександрович

Керівники роботи:

Недоля Анатолій Васильович

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.