Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U031490

Державний реєстраційний номер: 0121U107795

Відкрита

Дата реєстрації: 01-05-2024

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Багатофакторна комп'ютерна оптимізація складу, структури, технології виготовлення термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту

Початок етапу: 01-2021

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут термоелектрики Національної академії наук України та Міністерства освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02096091

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Науки, буд. 1, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58000, Україна

Телефон: 380372244422

Телефон: 380372244734

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут термоелектрики Національної академії наук України та Міністерства освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02096091

Адреса: вул. Науки, буд. 1, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58000, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380372244422

Телефон: 380372244734

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 654 1030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 4800.084 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Багатофакторна комп'ютерна оптимізація складу, структури, технології виготовлення термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту

Назва роботи (англ)

Multifactor computer optimization of the composition, structure, manufacturing technique of thermoelectric materials based on bismuth telluride

Реферат (укр)

Звіт про НДР: 217 с., 11 табл., 126 рис., 176 джерел: 1-45 джерела отримані в результаті виконання даної роботи, 46-176 – інші джерела. ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИЙ МАТЕРІАЛ, МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО, ЗОННА ПЕРЕКРИСТАЛІЗАЦІЯ, ЕКСТРУЗІЯ, СТРУКТУРА, МОДЕЛЮВАННЯ. Об'єкт дослідження – термоелектричний матеріал на основі Bi2Te3. Мета роботи – багатофакторна комп'ютерна оптимізація складу, структури, технології виготовлення термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту. Методи дослідження – методи математичної фізики для опису теплових та температурних полів, методи комп'ютерного моделювання для визначення їх просторового розподілу, експериментальні методи оптимізації технологічних процесів отримання матеріалів та вимірювання їх параметрів. Створено удосконалені комп'ютерні моделі формування структури термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3 в процесі їх отримання з розплавів та порошків. Визначено та експериментально підтверджено оптимальний склад компонент термоелектричних матеріалів на основі телуриду вісмуту n- та p-типу провідності. Проведено оптимізацію технологічного процесу та конструкції обладнання для виготовлення термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3, що дозволяють отримувати структурно досконаліші матеріали із підвищеними значеннями добротності та досягти конкурентної переваги вітчизняних термоелектричних перетворювачів енергії на світовому ринку. Розглянуто можливості використання методів штучного інтелекту для оптимізації термоелектричних матеріалів та підвищення їх якості. Розроблено методи та обладнання з підвищеною швидкодією для експериментального визначення властивостей термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3, що дозволяє формувати достатню та надійну базу даних для ефективного використання цих можливостей. Результати роботи впроваджено у виробництво модулів охолодження космічного призначення, що за своїми характеристиками перевищують світовий рівень. Умови одержання звіту: за договором. Інститут термоелектрики НАН України та МОН України.

Реферат (англ)

Research report: 217 pp., 11 tables, 126 figures, 176 sources: 1 to 45 sources were obtained as a result of this work, 46 to176 are other sources. THERMOELECTRIC MATERIAL, MATERIALS SCIENCE, ZONE RECRYSTALIZATION, EXTRUSION, STRUCTURE, COMPUTER SIMULATION. The object of study is a Bi 2Te3 based thermoelectric material. The purpose of the work is multifactorial computer optimization of the composition, structure, and manufacturing technology of bismuth telluride based thermoelectric materials. Research methods are methods of mathematical physics to describe thermal and temperature fields, computer simulation methods to determine spatial distribution, experimental methods for optimizing technological processes for obtaining materials and measuring their parameters. Advanced computer models for the formation of the structure of Bi2Te3 based thermoelectric materials in the process of their production from melts and powders have been developed. The optimal composition of components of thermoelectric materials based on n- and p-type bismuth telluride has been determined and experimentally confirmed. The technological process and design of equipment for the production of Bi2Te3 based thermoelectric materials have been optimized, thus enabling obtaining structurally more advanced materials with an increased figure of merit and achieving a competitive advantage for consumer thermoelectric energy converters on the world market. The possibilities of using artificial intelligence methods to optimize thermoelectric materials and improve their quality are considered. Methods and equipment with increased speed have been developed for the experimental determination of the properties of Bi2Te3 based thermoelectric materials, which allows the formation of a sufficient and reliable database for the effective use of these capabilities. The results of the work have been introduced into the production of cooling modules for space purposes, whose characteristics exceed the world level.

Індекс УДК: 621.315.5/.6; 621.318.1; 666.65

Коди тематичних рубрик НТІ: 47.09

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Комп'ютерні моделі формування структури термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3 в процесі їх отримання з розплавів та порошків

Назва продукції (англ): Computer models for the formation of the structure of Bi2Te3 based thermoelectric materials in the process of their production from melts and powders

Очікувані результати: Технології, Матеріали

Галузь застосування: 72.19

Опис продукції (укр): Дозволяють проводити оптимізацію технологічного процесу та конструкції обладнання для виготовлення термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3, що дозволяють отримувати структурно досконаліші матеріали із підвищеними значеннями добротності та досягти конкурентної переваги вітчизняних термоелектричних перетворювачів енергії на світовому ринку

Соціально-економічна спрямованість НТП: Збільшення обсягів виробництва, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів, Підвищення продуктивності праці, Підвищення автоматизації виробничих процесів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 01.202506.2025

Виробник продукції: Інститут термоелектрики НАН України та МОН України

Споживачі продукції: Організації термоелектричного приладобудування

Перспективні ринки: Вітчизняні та зарубіжні компанії, що випускають термоелектричну продукцію

Права інтелектуальної власності: Подано заявку на видачу охоронного документу, В Україні

Форми та умови передачі продукції: Продаж ліцензії, Продаж патента, Продаж продукції, Навчання персоналу, Інвестиції, Спільні НДДКР, Спільне виробництво

НТП 2

Назва продукції (укр): Структурно досконаліші термоелектричні матеріали із підвищеними значеннями добротності

Назва продукції (англ): Structurally more advanced thermoelectric materials with an increased figure of merit

Очікувані результати: Технології, Матеріали

Галузь застосування: 72.19

Опис продукції (укр): Термоелектричні матеріали на основі Bi2Te3 структурно досконаліші із підвищеними значеннями добротності

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Збільшення обсягів виробництва, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів, Підвищення продуктивності праці

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР, Експериментальний (макетний зразок)

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 10.202306.2024

Виробник продукції: Інститут термоелектрики НАН України та МОН України

Споживачі продукції: Організації термоелектричного приладобудування

Перспективні ринки: Вітчизняні та зарубіжні компанії, що випускають термоелектричну продукцію

Права інтелектуальної власності: Подано заявку на видачу охоронного документу, В Україні

Форми та умови передачі продукції: Продаж ліцензії, Продаж патента, Продаж продукції, Навчання персоналу, Спільні НДДКР, Спільне виробництво

7. Бібліографічний опис

. Наконечний О.Г., Коцур М.П., Вихор Л.М., Руснак М.А. Оптимізація функціоналів від розв'язків крайових задач із застосуванням в термоелектриці. Чернівці, Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2022, с.136.

Gorskyi P. V. Chapter 3. Some Thermoelectric Capabilities of Superlattices and Nanopowders // Nanoobjects & Nanostructuring. Volume I. / Edited by Lidiya M.Boichyshyn and Oleksandr. V. Reshetnyak. □ Mississauga, Ontario, Canada: Nova Printing Inc., 2022. P. 45-56.

Збірник задач «Чисельні методи у прикладній фізиці. Збірник задач». Видання II (доповнене) /укладач Маник О.М., відповідальний за випуск Анатичук Л.І. – Чернівці, 2023. – с.135.

Математичні моделі у прикладній фізиці: лабораторний практикум / укл. Маник О.М.– Чернівці: Чернівец. нац. ун-т ім. Ю. Федьковича, 2023. – 136 с.

Рибчаков Д.Є., Сербін М.В. Комп'ютерний метод опису технологій та властивостей термоелектричних матеріалів на основі Bi2-Te3, отриманих методом Бріджмена. Journal of Thermoelectricity.-2021.- № 3.-с. 45-52

Рибчаков Д.Є., Сербін М.В. Комп'ютерний метод опису технологій та властивостей термоелектричних матеріалів на основі Bi2-Te3, отриманих методом пресування. Journal of Thermoelectricity.-2021.- № 4. – с.5-12.

Короп М.М. Машинне навчання в термоелектричному матеріалознавстві.// Термоелектрика. – 2023. – №1. – С.41-52.

Рибчаков Д.Є. Комп'ютерний метод опису технологій та властивостей термоелектричних матеріалів на основі Bi2-Te3, отриманих методом екструзії.//Термоелектрика. – 2023. – №1. – С.53-61.

Рибчаков Д.Є. Використання комп'ютерного моделювання для оптимізації технологічних режимів виготовлення термоелектричних матеріалів методом вертикальної зонної плавки.// Термоелектрика. – 2023. – №2. – С.55-59.

L.M. Vikhor, M.P. Kotsur. Evaluation of efficiency for miniscale thermoelectric converter under the influence of electrical and thermal resistance of contacts. // Energies.

. Горський П.В. Сублімація леткої компоненти як можливий механізм деградації термоелектричного матеріалу // Фізика і хімія твердого тіла. 2022. Т. 23, № 2. С.204-209.

Gorskyi P.V. ThermoEMF of powder based thermoelectric materials // arXiv:2205.04929v1 [cond-mat.mes-hall], pp.1-3, 9 May, 2022.

Gorskyi P.V. Diffusion theory of electrical contact resistance of thermoelectric superlattice-metal couple // arXiv:2207.05065v1 [cond-mat.mes-hall], pp.1-7, 10July, 2022.

Горський П.В. Типові механізми деградації термоелектричних матеріалів і шляхи зниження їх впливу на надійність термоелектричних модулів.// Фізика і хімія твердого тіла. 2022. Т.23, №3. С.505-516.

Горський П.В. Теоретичні моделі граткової теплопровідності моно-кристалічного телуриду вісмуту.// Термоелектрика. – 2023. – №1. – С.5-12.

Vikhor, L.; Kotsur, M. Evaluation of Efficiency for Miniscale Thermoelectric Converter under the Influence of Electrical and Thermal Resistance of Contacts. Energies, 2023, Vol. 16, p. 4082-1 – 4082-22.

Kotsur M., Vikhor L. Simulation of thermoelectric coolers for optical electronic devices by means of optimal control methods. Proceedings of SPIE, Vol. 12938, 2023, p.1293828-1 – 1293828-5

Anatychuk L.I., Vikhor L.M., Matsenko I.D. Physical models of optical-electronic systems of the ir spectrum range with thermoelectric cooling (review) // Journal of Thermoelectricity – 2023. – №2. – С. 14-31. (IF Scopus = 0.5, ISSN: 1607-8829).

Анатичук Л.І., Гаврилюк М.В., Лисько В.В. Обладнання для визначення термоелектричних параметрів матеріалів у складі генераторних термоелектричних модулів // Термоелектрика. – 2021, №4. – С. 53-57.

Анатичук Л.І., Гаврилюк М.В., Лисько В.В. Обладнання для визначення термоелектричних параметрів матеріалів у складі термоелектричних модулів охолодження // Термоелектрика. – 2021, №4. – С. 60-72.

Анатичук Л.І., Разіньков В.В., Рибчаков Д.Є. Метод одержання екструдованого термоелектричного матеріалу. Заявка на корисну модель u 2022 00078 від 10.01.2022.

Спосіб отримання термоелектричного матеріалу на основі твердих розчинів Bi-Te методом зонної плавки (корисна модель) 06.12.2023, UA 154687 Разіньков В.В.,Маник О.М.

Анатичук Л.І., Разіньков В.В. Фільєра для одержання екстругованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te у вигляді стрічок. Заявка на корисну модель, u 2022 00175,17.01.2022.

Анатичук Л.І., Разіньков В.В. Пристрій для формування великого градієнту температури на фронті кристалізації в установці зонної плавки. Заявка на отримання патенту України, u 2022 00176 від 17.01.2022 р.

Процес визначення параметрів термоелектричного генераторного модуля / Анатичук Л.І., Лисько В.В. – Заявка № u202107636 від 28.12.2021р.

Процес визначення параметрів термоелектричного модуля охолодження / Анатичук Л.І., Лисько В.В. – Заявка № u202107695 від 28.12.2021р.

Пристрій для визначення параметрів термоелектричного генераторного модуля / Анатичук Л.І., Гаврилюк М.В., Лисько В.В. – Заявка № u202107691 від 28.12.2021р.

Rybchakov Denis. The use of computer modeling to optimize the technological modes for the manufacture of thermoelectric materials by the method of vertical zone melting. – Львів: конференція “ International Young Scientists Conference on Materials Science and Surface Engineering” 2023.

Ізвак Я. Метод експрес визначення параметрів уніполярних анізотропних термоелектричних матеріалів // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 137-138.

Рибчаков Д.Є Комп’ютерне моделювання процесу екструзії термоелектричного матеріалу на основі Bi-Te прямокутної форми. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, конференція “Молодіжна наука заради миру та розвитку” 2022. – С. 602-604.

Семешкін В. Вирощування монокристалів на основі Bi2Te3 у тонких щілинах // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (квітень-травень 2022 року). Інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2022. – С. 191-192.

Ковалік К. Історія розвитку термоелектричних матеріалів // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (квітень-травень 2022 року). Інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2022. – С. 103-104.

Тудорой П. Формування мікроструктури сплавів на основі халькогенідів вісмуту та сурми, отриманих загартуванням рідкого стану // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (квітень-травень 2022 року). Інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2022. – С. 227-228.

Тудорой П. Текстура екструдованих термоелектричних матеріалів на основі Bi-Te // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 247-248.

Сербин М. Добротність нелегованих твердих розчинів на основі Bi2Te3 // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп’ютерних наук. –

Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 213-214.

Поліщук А. Хімічний зв'язок у кристалах телуру // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 189-190.

Мицканюк Н. Сучасний стан контактних шарів між термоелектричним матеріалом на основі Bi-Te і металом // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 173-174.

Колещук П. Результати комп'ютерного моделювання впливу температури та розмірів нагрівника і охолоджувачів на процес вирощування термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3 методом вертикальної зонної плавки // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 131-132.

Гуменюк В. Результати комп'ютерного моделювання процесу вирощування термоелектричних матеріалів на основі Bi2Te3 із пропусканням електричного струму // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету (20-22 квітня 2021 року). Інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, 2021. – С. 79-80.

Дутчак С. Теоретичні моделі хімічного зв'язку в низькосиметричних кристалах Cd-Sb-Bi // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 123-124.

Ісанчук В. Матеріали для термомагнітних приймачів та прилади на їх основі // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 139-140.

Мазуркевич В. Контактні опори до термоелектричних матеріалів на основі Bi – Te // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 221-222.

Степаник Д. Теоретичні моделі хімічного зв'язку в потрійних системах Cd-Sb-Zn // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 343-344.

Струтинський Д. Комп'ютерне моделювання теплового та електричного полів у термоелектричних перетворювачах енергії // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 347-348.

Уласійчук С. Теоретичні моделі хімічного зв'язку Pb-Bi-Te // Матеріали студентської наукової конференції Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (25-27 квітня 2023 року). Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук. – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2023. – С. 369-370

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 217

Мова звіту: Українська

Умови поширення в Україні: Не заборонено

Умови передачі іншим країнам: Заборонено

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Гаврилюк Микола Васильович

Короп Микола Васильович

Лисько Валентин Валерійович (к. ф.-м. н.)

Рибчаков Денис Євгенійович

Руснак Ольга Сергіївна

Керівник організації:

Анатичук Лук'ян Іванович (д. ф.-м. н., академік НАНУ)

Керівники роботи:

Анатичук Лук'ян Іванович (д. ф.-м. н., академік НАНУ)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.