# Облікова картка НДДКР

**Державний обліковий номер:** 0213U003931

**Державний реєстраційний номер:** 0110U001832

**Відкрита**

**Дата реєстрації:** 08-02-2013

## 1. Етапи виконання

**Номер етапу:** 4

**Назва етапу:** Літературний огляд з теми проекту. Аналіз сучасного стану досліджень термодинамічних і кінетичних властивостей неідеальної плазми і кристалічних бінарних сполук. Постановка задач дослідження Дослідження елементарних процесів і розрахунок вкладів різних типів взаємодії між частинками в термодинамічні і кінетичні властивості неідеальної плазми і кристалічних бінарних сполук Аналітичне виведення моделі рівняння стану і методики розрахунку кінетичних коефіцієнтів неідеальних невпорядкованих хімічно реагуючих систем, плазми і кристалічних бінарних сполук. Розробка і тестування програмного забезпечення для чисельних розрахунків термодинамічних і кінетичних властивостей неідеальної плазми і кристалічних бінарних сполук Широкодіапазонні чисельні розрахунки термодинамічних і кінетичних властивостей неідеальної хімічно активної плазми і кристалічних бінарних сполук

**Початок етапу:** 01-2012

**Закінчення етапу:** 12-2012

**Вид звітного документа:** Остаточний звіт

## 2. Виконавець

**Назва організації:** Миколаївський національний університет імені В.О. Сухомлинського

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 02125444

**Підпорядкованість:** Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

**Адреса:** 54030, місто Миколаїв, вул. Нікольська, 24

**Телефон:** (0512) 37-88-28

**E-mail:** science@mdu.edu.ua

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

**Назва організації:** Миколаївський національний університет імені В.О. Сухомлинського

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 02125444

**Адреса:** вул. Нікольська, 24, м. Миколаїв, Миколаївський р-н., Миколаївська обл., 54030, Україна

**Підпорядкованість:** Міністерство освіти і науки України

**Телефон:** 0512378815

**E-mail:** office@mdu.edu.ua

**WWW:** http://mdu.edu.ua

## 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:** 2201020

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**Джерело фінансування:** 7713 - кошти держбюджету

**Фактичний обсяг фінансування за звітний етап:** 57 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Теоретичні дослідження та математичне моделювання термодинамічних і кінетичних процесів в неідеальній плазмі та твердому тілі

### Назва роботи (англ)

Theoretical researches and mathematical modeling of thermodynamical and kinetic processes in nonideal plasma and solids

### Реферат (укр)

Науково-дослідна робота присвячена вивченню фізичних процесів, що відбуваються в неідеальній хімічно-реагуючій плазмі та кристалічних ґратках твердотільних бінарних сполук. Об'єкт дослідження даної роботи - елементарні процеси в неідеальній багатокомпонентній плазмі, термодинамічні, оптичні та транспортні властивості, фазові переходи в неідеальній плазмі; електронні властивості, зонна структура, термодинамічні потенціали бінарних сполук, структурні фазові переходи в твердих тілах. Метою роботи було теоретичне дослідження та математичне моделювання термодинамічних і кінетичних процесів в неідеальній хімічно активній плазмі і бінарних твердотільних сполуках. Методи дослідження: метод хімічної термодинаміки, метод кінетичного рівняння, метод псевдо потенціалу, метод функціоналу густини, методи комп'ютерної алгебри, чисельні та аналітичні методи розв'язання диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь. В роботі враховано міжчастинкова взаємодія різних сортів заряджених і нейтральних частинок на фоні хімічних реакцій; проведено єдиний спосіб усереднення всіх членів в кінетичному рівнянні та інтерполяція прицільного параметра між областями слабкої та сильної неідеальності, використано наближення миттєвої та протяжної у часі дії випадкової сили, використано дробові числа заповнення для дослідження зонної структури і термодинамічних властивостей бінарних сполук. В результаті проведення науково дослідної роботи: Обчислені 2-й, 3-й і 4-й віріальні коефіцієнти взаємодії з участю нейтральних частинок в плазмі для різних типів потенціалів і побудованих на їх основі псевдо потенціалів. Отримані аналітичні співвідношення для термодинамічних функцій, рівняння стану та рівняння хімічної рівноваги багатокомпонентної плазми. Розроблена модель рівняння стану хімічно-реагуючої плазми з урахуванням кулонівської і ван-дер-ваальсової взаємодії на фоні хімічних реакцій. Розраховані транспортні перерізі розсіяння електронів на заряджених та нейтральних частинках в плазмі з урахуванням термодинамічної неідеальності. Розроблена система аналітичних обчислень скобкових інтегралів в інтегралі зіткнень Больцмана на основі методів комп'ютерної алгебри. Розроблена широкодіапазонна методика розрахунку електронних кінетичних коефіцієнтів неідеальної плазми на основі розв'язання кіне-тичного рівняння Больцмана. Проведені дослідження інтенсивності випромінювання гармонічного осцилятора в полі випадкової сили в наближенні миттєвої і протяжної в часі дії випадкової сили. Проведено вивчення впливу параметрів розрахунку (розмазка навколо рівня Фермі; параметри, що визначають збіжність розрахунків) на змінення зонної структури, рівняння стану, фазові перетворення тощо. Запропоновано розрахункові схеми, що включають параметр розмазки (який пов'язаний з дробовими числами заповнення енергетичних станів), і додаткові внески до енергії та тиску в рівнянні стану. Проведено розрахунки лужноземельних металів. Запропоновано використання одержаних параметрів для металів в розрахунках інтерметалічних сполук. Проведено широкодіапазонні чисельні розрахунки термодинамічних функцій і кінетичних коефіцієнтів неідеальної хімічно-активної плазми та розрахунки термодинамічних характеристик металів та інтерметалічних сполук.

### Реферат (англ)

Research work is dedicated to the study of the physical processes occurring in the non-ideal chemically-reacting plasma and crystalline lattices of solid-state binary compounds. Research object of this work is the elementary processes in non-ideal

multicomponent plasma, thermodynamic, optical and transport properties, phase transitions in non-ideal plasma; electronic properties, zone structure, thermodynamic potentials of the binary compounds, structural phase transitions in solids. The goal of this work was theoretical research and mathematical modeling thermodynamic and kinetic processes in non-ideal chemically active plasma and binary solid compound. Research methods: the method of chemical thermodynamics, kinetic equation method, method of pseudo-potential, density functional method, methods of computer algebra, numerical and analytical methods for solving differential and integral equations. The work takes into account the interparticle interaction of different sorts of charged and neutral particles with chemical reactions, presented a uniform way of averaging of all members in a kinetic equation and interpolation parameter between the weak and strong region of non idealness, was used approximation of instant and long-term effect of random forces, was used fractional occupation numbers for study of band structure and thermodynamic properties of binary compounds. As a result of this work the 2-nd, 3-rd and 4-th the virial coefficients of interaction in the plasma with neutral particles for different potentials and constructed on their basis of the pseudo-potential are calculated. Analytical relations for thermodynamic functions, equations of state and chemical equilibrium equations of multi-component plasma gain. A model of state equation of chemically-reacting plasma with Coulomb and Van der Waals interactions with chemical reactions developed. Cross sections of scattering on electron transport of charged and neutral particles in the plasma with taking into account no ideality of thermodynamic are calculated. A system of analytical calculations of bracket integrals in Boltzmann collision integral developed basing on the methods of computer algebra. The wide-range calculation procedure of electronic kinetic coefficients of non-ideal plasma based on solutions of the Boltzmann kinetic equation developed. The studies on the radiation intensity of harmonic oscillator under random forces in the approximation of instant and long-term effect of random forces were done. Study of influence of parameters of calculation (spreading around the Fermi level, settings determine convergence of the calculations) to changes in band structure, equations of state, phase transitions, etc. was done. Calculation schemas that include the spreading which is associated with fractional occupation numbers of the energy states and the additional terms into energy and pressure in the equation of state proposed. Calculations of the alkaline earth metals were done. Using of obtained parameters for the metals in the calculations of the intermetallic compounds proposed. The wide-range numeric calculations of thermodynamic functions and kinetic coefficients of non-ideal chemically-active plasma and calculations of thermodynamic characteristics of metals and intermetallic compounds were done.

**Індекс УДК:** 533.9:51-73, 533.9, 538.91

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 29.27.47

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Теоретичні дослідження та математичне моделювання термодинамічних і кінетичних процесів в неідеальній плазмі та твердому тілі

**Назва продукції (англ):** Theoretical researches and mathematical modeling of thermodynamical and kinetic processes in nonideal plasma and solids

**Очікувані результати:**

**Галузь застосування:** 73.10.0

**Опис продукції (укр):** Створена широкодіапозонна модель рівняння стану та методика розрахунку електронних кінетичних коефіцієнтів неідеальної плазми на основі розв'язання кінетичного рівняння Больцмана. Розраховані транспортні перерізі розсіяння електронів на заряджених та нейтральних частинках в плазмі з урахуванням термодинамічної неідеальності. Розроблена система аналітичних обчислень скобкових інтегралів в інтегралі зіткнень Больцмана на основі методів комп'ютерної алгебри. Проведено вивчення впливу параметрів розрахунку (розмазка навколо рівня Фермі; параметри, що визначають збіжність розрахунків) на термодинамічні характеристики металів та бінарних сполук.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:** .

**Виробник продукції:** МНУ

**Споживачі продукції:** фізики

**Перспективні ринки:** Україна

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

Статті 1).. Вижол Ю.О., Жорова А.М., Муленко І.О., Хомкіе О.Л. Розробка системи аналітичних обчислень на ЕВМ та їх застосування в кінетиці плазми.// Вісник Київського національного університету ім. Т. Шевченка. Серія фізико-математичні науки. - 2011, вип. 1, с.96-103. 2). Выжол Ю.А., Жорова А.Н., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Применение методов компьютерной алгебры к расчету скобочных интегралов.// ЖВМ и МФ, -Т.51, - №10, - 2011, с.1867-1882. 3). I.A. Mulenko, A.N. Zhorova, Ju. A. Vyzhol, A.L. Khomkin, A.I. Onishchenko Application of Methods of Computer Algebra for Doing Physical Sums.// JMR. - V.4. - № 4. - 2012, p. 89-115. 4). Выжол Ю.А., Козлова Л.Г., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Моделирование интенсивности излучения классического гармонического осциллятора в поле случайной силы.// Фізична інженерія поверхні. - Т.10. - №2 - 2012, с.200-206. 5). Выжол Ю.А., Жорова А.Н., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Решение кинетического уравнения Больцмана для полностью ионизованной плазмы с применением методов компьютерной алгебры.// ЖВМ и МФ, -Т.52, - №9, - 2012, с.1700-1706. 6). Атаманюк И.П., Кондратенко. Ю.П. Алгоритм оптимальной нелинейной экстраполяции зашумленной случайной последовательности.// Электронное моделирование -2012.- Том 34, №4.- С. 23-40. Тези доповідей: 1). Жорова А.Н., Муленко И.А. Електропровідність неідеальної повністю іонізованої плазми./ Збірник наукових праць Міжнародної конференції "Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- і наноструктур", Харків, 2009, Т.1, с.231-235. 2). Выжол Ю.А., Козлова Л.Г., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Моделирование интенсивности излучения классического гармонического осциллятора в поле случайной силы./ Матеріали всеукраїнської науково-практичної конференції САІУ - 2010. Запоріжжя, 2010, с. 41-44. 3). Поживатенко В.В. Тетрагональні структури B10 і L10 у розрахунках термодинамічних величин / Інформаційні технології в науці та освіті. - Миколаїв: МДУ, 2010. - С. 37 - 42. 4). Давиденко К.М. Модельні розрахунки з дробовими числами заповнення в металах на прикладі стронцію / Інформаційні технології в науці та освіті. - Миколаїв: МДУ, 2010. - С. 22 - 24. 5). Поживатенко В.В. Первопринципный расчёт термодинамических свойств тетрагональных модификаций InBi / 4-та Міжнародна науково-технічна конференція "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології" (СЕМСТ-4), Одеса, 30.06. - 2.07.2010р. - Одеса: Астропринт, 2010. - С. 158. 6). Поживатенко В.В. Использование методологии дробных чисел заполнения для исследования полиморфизма в щёлочноземельных металлах / XIII Всеукраїнська науково-методична конференція "Сучасні проблеми природничих наук та підготовка фахівців у цій галузі", Миколаїв, 2011. - 3с. 7). Выжол Ю.А., Жорова А.Н., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Разработка системы аналитических вычислений на ЭВМ и ее применение в кинетике плазмы./ Тези доповідей Міжнародної конференції "Теоретичні та прикладні аспекти побудови програмних систем", Київ, 2010, С.138-147. 8). Выжол Ю.А., Козлова Л.Г., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Интенсивность излучении классического гармонического осциллятора в поле случайной силы./ Тези доповідей Міжнародної конференції "Теоретичні та прикладні аспекти побудови програмних систем", Київ, 2010, С.148-153. 9). Выжол Ю.А., Жорова А.Н., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Разработка систем аналитиче-ских вычислений на ЭВМ интеграла столкновений./ Тезисы докладов XXXVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Москва, 2011, с.209. 10). Выжол Ю.А., Козлова Л.Г., Муленко И.А., Хомкин А.Л. Моделирование интенсивности излучения классического гармонического осциллятора в поле случайной силы./ Тезисы докладов XXXVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Москва, 2011, с.210. 11) Жорова А.Н., Муленко И.А. Розробка і застосування систем аналітичних обчислень до розрахунку електропровідності неідеальної плазми./ Тези доповідей XIII Всеукраїнської науково-методичної конференції "Сучасні проблеми фізико-математичних наук та підготовка фахівців у цій галузі", Миколаїв, 2011 - с. 64-65.

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 227

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 3

## 9. Заключні відомості

## Перелік осіб-виконавців

Атаманюк Ігор Петрович

Вижол Юрій Олександрович

Жорова Алла Миколаївна

Козлова Лілія Геннадіївна

Муленко Іван Олексійович

Поживатенко Віталій Володимирович

Чебанова Юлія Петрівна

Шведов Леонід Петрович (к. т. н.)

**Керівник організації:**

Будак Валерій Дмитрович

**Керівники роботи:**

Муленко Іван Олексійович

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ**

Юрченко Т.А.