Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U101825

Державний реєстраційний номер: 0118U001427

Відкрита

Дата реєстрації: 12-11-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Квантовохімічні розрахунки властивостей графеноподібних вуглецевих нанокластерів в основному та електронно збудженому станах: магнітних моментів, розподілів спінової густини та електростатичного потенціалу. Розробка технологічних підходів до виготовлення сонячних елементів на основі багатошарових гетероструктур. Розробка принципів побудови і функціонування нанопристроїв, які перетворюють енергію фото-збудження в кінетичну енергію направленого руху. Експериментальне дослідження ниткоподібних мікроструктур, легованих аморфним силіцієм на поверхні кристалічного кремнію.

Початок етапу: 01-2018

Закінчення етапу: 12-2018

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03291669

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Телефон: 380444229632

E-mail: info@isc.gov.ua

Інше: +380444243567

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442350981

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.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: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 4480.43 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання процесів фізико-хімічного модифікування оксидних і вуглецевих наносистем різних розмірів та розмірності в умовах дії зовнішніх чинників

Назва роботи (англ)

Modeling processes of physicochemical modification of oxide and carbon nanosystems of different sizes and dimensions under conditions of external factors influence

Реферат (укр)

Теоретично досліджено рух броунівських частинок в асиметричному просторово періодичному потенціалі в наближенні кінцевої тривалості релаксаційного відгуку системи на детерміністичні дихотомні (ступінчасті) флуктуації. Передбачалося, що період цих флуктуацій набагато перевищує характерний час дифузії, і що висоти потенціальних бар'єрів малі в порівнянні з тепловою енергією (адіабатичний високотемпературний пульсуючий ретчет). Виведено аналітичні вирази для середньої швидкості частинки, вони конкретизовані для пилоподібного профілю стаціонарної частини потенціальної енергії наночастинки. Виявлено різну – лінійну і квадратичну – поведінку середньої швидкості броунівського мотора як функції часу релаксації для гранично і не гранично асиметричних потенціальних профілів відповідно. Результати інтерпретовані в термінах автомодельного опису. Крім того, отримано співвідношення, що інтерпретують середній потік частинок (швидкість броунівського ретчета) в термінах Фур'є-компонент стаціонарної і флуктуюючої частин потенціальних профілів і кореляційних функцій керуючого процесу, а також окремі випадки цих співвідношень для просторово-гармонійних направляючих сигналів (флуктуацій) і періодичних (гармонійних і ступінчастих) часових змін потенціальної енергії. Співвідношення застосовано для розрахунку характеристик відповідних броунівських ретчетів.

Реферат (англ)

The Brownian motion is theoretically investigated in an asymmetric spatially periodic potential in approximation of the finite duration of the relaxation response of the system to deterministic dichotomous (stepped) fluctuations. It was assumed that the period of these fluctuations far exceeds the characteristic diffusion time, and that the heights of potential barriers are small compared to thermal energy (adiabatic high-temperature pulsating retc). Analytical expressions for the average velocity of the particle are deduced, they are specified for the pulverized profile of the stationary part of the potential energy of the nanoparticle. Different - linear and quadratic - behavior of the average Brownian motor speed as a function of relaxation time for extremely and not asymmetric potential profiles, respectively, were revealed. The results are interpreted in terms of self-description. In addition, the relations that interpret the mean particle flux (Brownian retc velocity) in terms of the Fourier components of the stationary and fluctuating parts of the potential profiles and correlation functions of the control process, as well as the individual cases of these relationships for spatial harmonic directing fluctuations, are obtained. and periodic (harmonic and stepped) time changes of potential energy. The ratio is used to calculate the characteristics of the corresponding Brownian retweets.

Індекс УДК: 544, 544.23

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Метод теоретичного опису структури наночастинок оксидів та систем на їх основі.рів та розмірності і створенні відповідного пакету розрахункових модулей

Назва продукції (англ): The method of theoretical description of the structure of nanoparticles of oxides and systems based on them.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19

Опис продукції (укр): Метод теоретичного опису структури наночастинок оксидів та систем на їх основі, залежності фізико-хімічних властивостей від геометричних розмірів та розмірності і створенні відповідного пакету розрахункових модулей.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Забезпечення промисловості чи населення новим видом інформаційно-комунікаційних послуг

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: ІХП ім. О.О. Чуйка НАН України

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Smirnova O.V., Grebenyuk A.G., Lobanov V.V. Theoretical spatial structure and spectral characteristics of various ZrO2 nanoparticles and Zr doped TiO2 films // International research and practice Conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2018) (27-30 August 2018, Kyiv, Ukraine): Book of abstracts. – P.542-543.

O.I. Tkachuk, M.I. Terebinska, Ya.S. Krivoruchko, V.V. Lobanov. STRUCTURE AND PROPERTIES OF Ge ADSORPTION COMPLEXES ON THE Si(001) FACE // X INTERNATIONAL CONFERENCE ON TOPICAL PROBLEMS OF SEMICONDUCTOR PHYSICS Truskavets, UKRAINE June 25 – 28, 2018 P. 152-155.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 64

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

Гічан Ольга Іванівна (к.ф.-м.н.)

Гаврилюк Олександр Олександрович (к.ф.-м.н.)

Гребенюк Анатолій Георгійович (к.х.н., с.н.с.)

Дем'яненко Євгеній Миколайович (к.х.н.)

Канєвський Василь Іванович (к. т. н., доц.)

Карпенко Оксана Сергіївна

Козирєв Юрій Миколайович (к.ф.-м.н., с.н.с.)

Корочкова Таїсія Євгенівна (к.ф.-м.н.)

Кравченко Андрій Анатолійович (к.х.н.)

Лобанов Віктор Васильович (д. х. н., професор)

Покутній Сергій Іванович (д.ф.-м.н.)

Розенбаум Віктор Михайлович (д.ф.-м.н., професор)

Семчук Олександр Юрійович (д.ф.-м.н., с.н.с.)

Смірнова Олеся Валентинівна (к.х.н.)

Теребінська Марія Іванівна (к.х.н.)

Ткачук Ольга Іванівна

Філоненко Оксана В'ячеславівна (к.х.н.)

Керівник організації:

Картель Микола Тимофійович (д. х. н., професор)

Керівники роботи:

Лобанов Віктор Васильович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.