Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U031469

Державний реєстраційний номер: 0122U001969

Відкрита

Дата реєстрації: 30-04-2024

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Одержання результатів теоретичних та експериментальних досліджень гетероструктурних нанокомпозитів.

Початок етапу: 01-2023

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Телефон: 380442393333

Телефон: 380442393230

E-mail: office@knu.ua

WWW: http://www.univ.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/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: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 960.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Інтерфейси в гетероструктурних нанокомпозитах: теоретичне моделювання і експериментальні дослідження електронних та оптичних процесів

Назва роботи (англ)

Interfaces in heterostructural nanocomposites: theoretical modeling and experimental studies of electronic and optical processes

Реферат (укр)

Одержано результати теоретичних розрахунків атомної та електронної структури, оптичних сталих, оптичних спектрів та провідності інтерфейсних шарів нанокомпозитів відібраних типів. Методами молекулярної динаміки та електронної структури проведене теоретичне моделювання атомної структури, електронних властивостей та оптичних спектрів нанокомпозиційних матеріалів (склокерамік) різного складу та будови, зокрема «кристал $KBi(MoO_4)_2$ / фосфатно-молібдатне скло», «кристал $K_2Eu(PO_4)(WO_4)$ / фосфатно-вольфраматне скло» та «кристал $LaVO_4$ / боратне скло». За результатами розрахунків атомної будови проведено аналіз структури найближчого кисневого оточення атомів вісмуту в фосфатно-молібдатних склокераміках. В аналізі одержано пояснення експериментально спостереженим змінам в спектральних характеристиках люмінесценції домішкових іонів Eu^{3+}, які заміщують атоми вісмуту в досліджених зразках склокерамік. Одержано результати розрахунків енергій збуджених електронних станів окремих атомів, іонів та молекулярних фрагментів інтерфейсних областей, які можуть бути центрами люмінесценції досліджених нанокомпозиційних матеріалів. Для пояснення формування експериментально спостережених властивостей вісмут-вмісних склокерамік часово-залежним методом функціоналу електронної густини (TD-DFT) проведено теоретичні розрахунки оптичних спектрів іонів вісмуту та молібдатних груп, що знаходяться в різних просторових областях склокераміки «кристал $KBi(MoO_4)_2$ / фосфатно-молібдатне скло» і можуть бути центрами люмінесценції такого матеріалу. Одержано експериментальні характеристики електричної провідності, спектрів оптичного поглинання/відбивання та люмінесценції нанокомпозиційних матеріалів, інтерфейси яких досліджено розрахунковими методами. За результатами експериментальних та теоретичних досліджень з`ясована природа смуг власної фотолюмінесценції фосфатно-молібдатних стекол та склокерамік на їх основі.

Реферат (англ)

Results of theoretical calculations of atomic and electronic structure, optical constants, optical spectra and conductivity of interface layers of nanocomposites of selected types were obtained. Using the methods of molecular dynamics and electronic structure, theoretical modeling of the atomic structure, electronic properties, and optical spectra of nanocomposite materials (glass ceramics) of different composition and structure was carried out, in particular "$KBi(MoO_4)_2$ crystal / phosphate-molybdate glass", " $K_2Eu(PO_4)(WO_4)$ crystal / phosphate-tungstate glass" and "$LaVO_4$ crystal / borate glass". The structure of the nearest oxygen surrounding of bismuth atoms in phosphate-molybdate glass-ceramics was analyzed using the results of atomic structure calculations. The analysis provided an explanation for the experimentally observed changes in the spectral characteristics of luminescence of Eu^{3+} impurity ions, which replace bismuth atoms in the investigated glass-ceramic samples. Results of calculations of the energies of the excited electronic states of particular atoms, ions and molecular fragments of the interface regions, which can be the centers of luminescence of the studied nanocomposite materials, were obtained. To explain formation of the experimentally observed properties of bismuth-containing glass-ceramics, theoretical calculations of the optical spectra by the time-dependent density functional theory (TD-DFT) method were carried out for bismuth atoms and molybdate groups located in different spatial regions of glass ceramics "$KBi(MoO_4)_2$ crystal / phosphate-molybdate glass" and can form the centers of luminescence of this material. Experimental characteristics of electrical conductivity, optical absorption/reflection and luminescence spectra were obtained for nanocomposite materials, the interfaces of which were investigated by computational methods.

Індекс УДК: 535; 539.183/.184; 681.7; 77 , 535.33/.34 , 535.14; 535.33:621.373.8

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.31, 29.31.26, 29.33

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Теоретичне моделювання атомної структури, електронних властивостей та оптичних спектрів нанокомпозиційних матеріалів.

Назва продукції (англ): Theoretical modeling of atomic structure, electronic properties and optical spectra of nanocomposite materials.

Очікувані результати: Нові методики

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Опис продукції (укр): Методами молекулярної динаміки та електронної структури проведене теоретичне моделювання атомної структури, електронних властивостей та оптичних спектрів нанокомпозиційних матеріалів (склокерамік) різного складу та будови, зокрема «кристал $KBi(MoO_4)_2$ / фосфатно-молібдатне скло», «кристал $K_2Eu(PO_4)(WO_4)$ / фосфатно-вольфраматне скло» та «кристал $LaVO_4$ / боратне скло». За результатами розрахунків атомної будови проведено аналіз структури найближчого кисневого оточення атомів вісмуту в фосфатно-молібдатних склокераміках. В аналізі одержано пояснення експериментально спостереженим змінам в спектральних характеристиках люмінесценції домішкових іонів Eu^{3+}, які заміщують атоми вісмуту в досліджених зразках склокерамік. Одержано результати розрахунків енергій збуджених електронних станів окремих атомів, іонів та молекулярних фрагментів інтерфейсних областей, які можуть бути центрами люмінесценції досліджених нанокомпозиційних матеріалів. Для пояснення формування експериментально спостережених властивостей вісмут-вмісних склокерамік часово-залежним методом функціоналу електронної густини (TD-DFT) проведено теоретичні розрахунки оптичних спектрів іонів вісмуту та молібдатних груп, що знаходяться в різних просторових областях склокераміки «кристал $KBi(MoO_4)_2$ / фосфатно-молібдатне скло» і можуть бути центрами люмінесценції такого матеріалу. Одержано експериментальні характеристики електричної провідності, спектрів оптичного поглинання/відбивання та люмінесценції нанокомпозиційних матеріалів, інтерфейси яких досліджено розрахунковими методами. За результатами експериментальних та теоретичних досліджень з`ясована природа смуг власної фотолюмінесценції фосфатно-молібдатних стекол та склокерамік на їх основі. Досліджено морфологічні характеристики та спектрально-люмінесцентні властивості літій-ванадат-боратних скляних матриць складу (xLi_2O-yV_2O_5-$(100-x-y)B_2O_3$).

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Київський національний університете імені Тараса Шевченка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних - 6; статті у наукових журналах, збірниках наукових праць, матеріалах конференцій тощо - 2; статті у фахових виданнях України категорії «Б» - 1; публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях - 17; монографії та розділи монографій, опубліковані у закордонних видавництвах іноземними мовами - 1; монографії та розділи монографій, опубліковані в українських видавництвах - 1;

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 168

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

Борисюк Віктор Іванович (к. ф.-м. н.)

Неділько Сергій Герасимович (д. ф.-м. н., с.н.с.)

Теселько Петро Олексійович

Чорній Віталій Петрович (к. ф.-м. н., н.с)

Чукова Оксана Володимирівна (к. ф.-м. н., с.н.с.)

Щербацький Василь Петрович

Ящук Василь Павлович (к. ф.-м. н., н.с)

Керівник організації:

Толстанова Ганна Миколаївна (д. б. н., професор)

Керівники роботи:

Хижний Юрій Анатолійович (д. ф.-м. н., н.с)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.