Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U004234

Державний реєстраційний номер: 0112U001739

Відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження впливу домішок на рівноважні і кінетичні властивості наноструктур та їх розчинів

Початок етапу: 01-2012

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова. Наукова частина

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071091

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 65082. м. Одеса, вул. Дворянська, 2

Телефон: (048)7317151

Телефон: 7317151

E-mail: science@onu.edu.ua

Інше: onu.edu.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Одеський національний університет імені І.І.Мечникова

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071091

Адреса: вул. Дворянська 2, м. Одеса, Одеська обл., 65058, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380487235254

WWW: http://onu.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: 696.666 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Дослідження впливу домішок на рівноважні і кінетичні властивості наноструктур та їх розчинів

Назва роботи (англ)

Investigation of the influence of impurities on the equilibrium and kinetic properties of nanostructures and their solutions.

Реферат (укр)

Розроблено алгоритм для урахування впливу точкових дефектів на електронну структуру графену і нанотрубок. На основі раніш розробленого алгоритму досліджено зонну структуру графану. Розроблено метод визначення типу і концентрації домішок по оптичним спектрам графену і нанотрубок. Розроблено універсальний підхід до вивченя кластерної структури рідкої води та насиченого водного пара. З'ясовано, що поблизу температури кристалізації в структурі води домінують тетраметри, при підвищені температури - тримери, при наближенні до критичної температури - димери.

Реферат (англ)

An algorithm for the effect of point defects on the electronic structure of graphene and nanotubes is developed. Based on previously developed algorithm, the band structure of grafana is studied. A method for determining the type and concentration of impurities on the optical spectra of graphene and nanotubes is developed. T A universal approach to study the cluster structure of liquid water and saturated steam is developed. We found that in the vicinity of the crystallization temperature of the water - tetramers predominate in the water structure , at higher temperatures - trimers, approaching to the critical temperature - dimers.

Індекс УДК: 517.958:52/59, УДК 538.9+536.4

Коди тематичних рубрик НТІ: 27.35

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Вплив домішок на рівноважні і кінетичні властивості наноструктур та їх розчинів

Назва продукції (англ): The influence of impurities on the equilibrium and kinetic properties of nanostructures and their solutions

Очікувані результати:

Галузь застосування: 73.10

Опис продукції (укр): Розроблено алгоритм для урахування впливу точкових дефектів на електронну структуру графену і нанотрубок. Досліджено зонну структуру графану.Розроблено універсальний підхід до вивченя кластерної структури рідкої води та насиченого водного пара.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2013-2014рр.

Виробник продукції: ОНУ імені І.І.Мечникова

Споживачі продукції: ВНЗ, Інститути АН УКРАЇНИ

Перспективні ринки: Україна,дальне зарубіжжя

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: за договорами

7. Бібліографічний опис

1.V. Adamyan and V. Zavalniuk. Phonons in graphene with point defects. J. Phys. Condens. Matter, 24, 415401 (7pp) (2012) // arXiv:1206.2871 2.V.Yu.Bardik, N.P.Malomuzh, K.S.Shakun. High-frequency asymptote for the velocity auto-correlation function spectrum of argon-like systems. J. Chem. Phys. 136, (2012) 244511-244511-8. 3.V. Zavalniuk. Axial stiffness of multiwalled carbon nanotubes as a function of the number of walls, Ukr.J.Phys. 57, pp. 933-9 (2012) // arXiv:1104.1350 4.P.V. Makhlaichuk, M.P. Malomuzh and I.V. Zhyganiuk. Nature of Hydrogen Bond in Water, Ukr.J.Phys. 57, p.113-7 (5pp) (2012) 5.D.Yu. Mishagli. The Influence of Screening Effects on the Grain Charge in a Thermal Dusty Plasma, Ukr.J.Phys. 57, pp. 824-33 (2012) 6.Шаповалов И. П. Квадрупольные фазы и фазовые переходы в одноосных магнетиках с тензорными взаимодействиями . Физ. низк.темп. - 2013. - Т. 39, № 6 - С. 663-671. doi: 10.1063/1.4811336 7. I.P. Shapovalov and P.A. Sayko. Quadrupole hysteresis in uniaxial magnet with unity spin. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 348, 132-135 (2013) 8.P.V. Makhlaichuk, M.P. Malomuzh, I.V. Zhyganiuk Dimeriztion of water molecules. Modeling of the attractive part of the interparticle potential in the multipole approximation. Ukr. J. Phys. - 2013. - Vol. 58, - No.3, - P. 278-288. 9. Т.В. Локотош, Н.П. Маломуж, К.Н. Панкратов Пространственно-временные масштабы в Лагранжевой теории тепловых гидродинамических флуктуаций // ЖСХ - 54,10 (2013) S17-S23. (с.). 10. Н.П. Маломуж, В.Н. Махлайчук, П.В. Махлайчук, К.Н. Панкратов. Кластерная структура воды в соответствии с данными по диэлектрической проницаемости и теплоемкости воды// ЖСХ - 54, Supplement 1 (2013) S24-S39. 11.N.P. Malomuzh, V.N. Mahlaichuk, S.V. Khrapatyi. Water dimer equilibrium constant of saturated vapor. Russian Journal of Physical Chemistry A, Vol 88, № 8, 1287-1292 (2014) 12.N.P. Malomuzh, V.N. Mahlaichuk, S.V. Khrapatyi. Water dimer dipole moment. Russian Journal of Physical Chemistry A, Vol 88, № 8, 1431-1435 (2014) 13.N.P. Malomuzh, P.N. Mahlaichuk, S.V. Khrapatyi. Heat capacity and cluster structure of saturated water vapor. Russian Journal of Physical Chemistry A, vol 88, № 9, 1450-1455 (2014) 14.L.A. Bulavin, P.V. Makhlaichuk, S.V. Khrapatiy. "Direct calculation of the dimerization constant for the saturated water vapor", Proceedings of NAS of Ukraine, №. 11 (2014) 15. P. P. Bezverkhy,V. G. Martynets, V. N. Bondarev .Nonclassical critical indices in the statistical theory of liquids and equations of state with regular and scaling components. Russian Journal of Physical Chemistry A, Volume 88, № 4, pp 566-572,(2014). 16. B. A. Altoiz,V. N. Bondarev, E. A. Shatagina, S. V. Kiriyan. Model of organization of the epitropic liquid phase. Technical Physics., Volume 59, Issue 7, pp 1003-1006 (

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 67

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

Адамян Вадим Мовсесович

Бондарев Віктор Миколайович

Завальнюк Володимир Вікторович

Маломуж Микола Петрович

Махлайчук Віктор Миколайович

Махлайчук Павло Вікторович

Роговська Ємма Тадеушевівна

Шаповалов Ігор Петрович

Керівник організації:

Коваль Ігор Миколайович

Керівники роботи:

Адамян Вадим Мовсесович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.