

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U000584

Державний реєстраційний номер: 0121U113567

Відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2024



1. Етапи виконання

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розроблення числової моделі інтенсивності випромінювання з Темних віків і Космічного світанку, математичної моделі росту корозійно-втомних коротких тріщин, синтез нових об'ємних, нанорозмірних та композитних функціональних матеріалів, нових інтерметалічних сполук, дослідження водневої системи осадового басейну, особливості функціонування флювіальних процесів різнопорядкових річок

Початок етапу: 04-2023

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070987

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Телефон: 380322616048

E-mail: zag_kan@lnu.edu.ua

WWW: <http://www.lnu.edu.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: 2201390

Напрямок фінансування: 2.7 - інше (Підтримка пріоритетних напрямків наукових досліджень і науково-технічних

(експериментальних розробок) у закладах вищої освіти)

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 4713.800 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Нові речовини, матеріали, види матерії та підходи до енергозбереження та охорони довкілля

Назва роботи (англ)

New substances, materials, types of matter and approaches to energy saving and environmental protection

Реферат (укр)

Створено числові моделі для розрахунку спектральної густини випромінювання протогалактик (гало) Темних віків і Космічного світанку в космологічних моделях з темною матерією, темною енергією, первісним магнітним полем та світлом перших об'єктів. Розроблено розрахункову модель для визначення залишкового ресурсу елементів конструкцій з короткими тріщинами за дії циклічного навантаження і корозивного середовища. Синтезовано боратні стекла, активовані іонами лантанідів, які мають великий потенціал застосування для створення білих світлодіодів. З'ясовано механізми релаксації електронних збуджень та природа екситонних станів в об'ємних та нанорозмірних кристалах CeF₃. Виходячи з першопринципних розрахунків в межах теорії функціоналу електронної густини оцінено вплив домішок на електронну структуру та фізичні властивості наноструктур на основі ZnO та їхнього потенційного застосування в наноелектронних і спінтронних приладах. Спрогнозовано та синтезовано нові неописані раніше органічні флуорофори на основі гетероциклічних сполук, придатні до конструювання OLED-пристроїв. Синтезовано нові інтерметалічні сполуки, встановлено фазові рівноваги, побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану, визначено кількісні характеристики хімічних і фізичних властивостей сполук для вибору хімічних складів, що відповідають оптимальним структурним, електрокінетичним, магнітним та термоелектричним властивостям. Встановлено розподіл потоків водню через ґрунтовий шар в межах осадових басейнів Західного нафтогазоносного регіону. Розроблено концепції міграції природнього водню в осадових басейнах та методики картування витоків водню за варіаціями складу ґрунтового газу. З'ясовано особливості флювіального рельєфу та розвитку флювіальних процесів ключової ділянки у районах впливу вузлів злиття різнопорядкових водотоків у басейні річки Сукіль у межах Скибових Карпат та оцінено їхню роль у функціонуванні річкових систем в умовах змін клімату та антропопресії на геосередовище.

Реферат (англ)

Numerical models were created to calculate the spectral density of protogalaxie radiation of the Dark Ages and the Cosmic Dawn in cosmological models with dark matter, dark energy, the primordial magnetic field, and the light of the first objects. A model was developed to determine the residual life of structural elements with short cracks under the action of cyclic strain and a corrosive environment. Borate glasses activated by lanthanide ions were synthesized for white LEDs. The relaxation mechanisms of electronic excitations and the nature of exciton states in bulk and nanoscale CeF₃ crystals were estimated. Based on first-principle calculations within the electron DFT, the effect of impurities on the electronic structure and physical properties of ZnO-based nanostructures and their potential application in nanoelectronic and spintronic devices was assessed. New organic fluorophores based on heterocyclic compounds, suitable for the construction of OLED devices, were predicted and synthesized. New intermetallic compounds were synthesized, phase equilibria were established, isothermal sections of state diagrams were constructed, quantitative characteristics of chemical and physical properties of compounds were determined for chemical compositions corresponding to optimal structural, electrokinetic, magnetic and thermoelectric properties. The distribution of hydrogen flows through the soil layer within the sedimentary basins of the Western oil and gas region was established. Concepts of natural hydrogen migration in sedimentary basins and methods of hydrogen leakage mapping based on soil gas composition variations were developed. The unique characteristics of the fluvial terrain and processes in a pivotal zone affected by various river confluences in the Sukil River basin within the Skole Beskids have been identified. Their role in river

system function amid climate change and human impact on the environment has been assessed.

Індекс УДК: 621.318.1, 666.265; 621.387.464, 669:66-963, 621.351/.355, 620.193:669; 620.193:669.018.8, 550.3:504, 550.8:553.3/.9, 524.6

Коди тематичних рубрик НТІ: 45.09.29, 47.09.43, 53.41.43, 61.13.27.19, 81.33.07, 37.01.94, 38.57, 41.27.25

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Нові речовини, матеріали, види матерії та підходи до енергозбереження та охорони довкілля

Назва продукції (англ): New substances, materials, types of matter and approaches to energy saving and environmental protection

Очікувані результати: Технології, Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: фізичне та хімічне матеріалознавство, пошук родовищ корисних копалин, радіоастрономія, охорона довкілля

Опис продукції (укр): Розроблено комп'ютерні програми для числового інтегрування системи рівнянь кінетики формування/руйнування перших молекул, іонізації/рекомбінації гідрогену і гелію, енергетичного балансу та рівнянь кінетики заселеностей найнижчих енергетичних рівнів атомарного гідрогену та перших молекул в епоху Темних віків і Космічного світанку при заданих моделях енергетичного розподілу випромінювання перших джерел світла. Отримано усереднені по небу інтенсивності радіовипромінювання в лініях перших молекул та в лінії надтонкої структури атомарного гідрогену у різних космологічних моделях. Побудовано ефективну математичну модель для визначення залишкового ресурсу тонкостінних елементів конструкцій з короткими тріщинами за дії циклічного навантаження і корозивного середовища. Синтезовано нові лігій-боратні стекла, леговані іонами лантанідів, які демонструють люмінесцентні параметри, придатні для створення білих світлодіодів. З'ясовано вплив розмірних ефектів на міграцію електронних збуджень в об'ємних та нанорозмірних кристалах СеF3. Оцінено вплив домішок на електронну структуру та фізичні властивості наноструктур на основі ZnO. Запропоновано модель нейронної мережі для апроксимації потенціалів міжатомної взаємодії багатоатомних систем. Розроблено ефективні та ресурсощадні методи та отримано нові органічні люмінесцентні матеріали з ефектами термоактивованої уповільненої флуоресценції та механолюмінесценції. Отримані матеріали застосовано для створення OLED пристроїв. Синтезовано нові сполуки на основі інтерметалідів для хімічних джерел електричної енергії, термоелементів, постійних магнітів, конструкційних і захисних елементів. З'ясовано параметри міграції та акумуляції водню в різних типах ґрунтів та в залежності від їх рівня вологості. Виявлено аномальні зони із високою концентрацією водню. Дано прогнозну оцінку впливу змін клімату та зростаючої антропопресії на функціонування басейнових систем, у тім числі формуванні локальних повеней і паводків.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція, Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Львівський національний університет імені Івана Франка

Споживачі продукції: НВП «Електрон-Карат» (м. Львів), Інститут сциниляційних матеріалів НАН України (м. Харків)

Перспективні ринки:

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

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

7. Бібліографічний опис

Novosyadlyj B. Formation of the hydrogen line 21-cm in Dark Ages and Cosmic Dawn: dependences on cosmology and first light

/ Novosyadlyj B. Novosyadlyj, Yu. Kulinich, G. Milinevsky, V. Shulga // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 2023. – Vol. 526. – P. 2724–2735.

Новосядлий Б. Сигнал в лінії надтонкої структури основного стану гідрогену з епохи Темних віків як космологічний тест / Б. Новосядлий, Ю. Кулініч, О. Коноваленко // Журн. фіз. досл. – 2023 (прийнята до друку, грудень 2023).

Коноваленко О. Про можливість детектування глобального сигналу в лінії надтонкої структури основного стану гідрогену з епохи Темних віків / О. Коноваленко, В. Захаренко, Б. Новосядлий // Журн. фіз. досл. – 2023 (прийнята до друку, грудень 2023).

Acharyya A. Sensitivity of the Cherenkov Telescope Array to TeV photon emission from the Large Magellanic Cloud / A. Acharyya, B. Novosyadlyj, O. Petrucek et al. // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 2023. – V.523. – P. 5353–5387.

Acharyya A. Sensitivity of the Cherenkov Telescope Array to TeV photon emission from the Large Magellanic Cloud / A. Acharyya, B. Novosyadlyj, O. Petrucek, I. Sushch et al. // Astroparticle Physics – 2023. – V. 150. – P. 102850.

Андрейків О.Є. Визначення залишкової довговічності пластини зі системою тріщин за дії довготривалого статичного навантаження і корозивного середовища / О.Є. Андрейків, І.Я. Долінська, Н.С. Звягін, М.О. Любчак // Фізико-хімічна механіка матеріалів. – 2023. – № 5. – С. 61–67.

Stankevych V.Z. Analysis of 3D problems of dynamic loading of elastic piecewise-homogeneous bodies with internal cracks / V.Z. Stankevych // Journal of Mathematical Sciences. – 2023. □ 274, No. 5. □ P. 641–659.

Przystupa K. The Influence of Halide Ion Substitution on Energy Structure and Influence of Halide Ion Substitution on Energy Structure and Luminescence Efficiency in CeBr₂I and CeBr₂ Crystals / K. Przystupa, Ya. Chornodolsky, Ja. Selech, V. Karanushenko, T. Demkiv, O. Kochan, S. Syrotyuk, A. Voloshinovskii // Materials. – 2023. – V. 16, № 14. – P. 5085.

Chornodolsky Ya. M. Energy structure of CeCl₂Br and CeCl₂Br₂ crystals / Ya. M. Chornodolsky, V. O. Karanushenko, S. V. Syrotyuk, L. D. Bolibrukh, S. O. Ihnatsevych, O. T. Antonyak, A. S. Voloshinovskii // J. of Phys. Stud. – 2023. – V.27, № 3. – P. 3702.

Moroz M. Optimizing Neural Network Wavefunctions Using Variational Monte Carlo with Evolution Strategies / M. Moroz, O. Bovgyra // 2023 IEEE 13th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT). – 2023. – P. 43–46.

B. Mahlovanyi, M. Truax, A. Luchchko, Y. Shpotyuk, G. Yang, R. Golovchak, A. Kovalskiy, J. Cebulski. Optical properties and tunable luminescence of Ce³⁺/Dy³⁺ doped lithium borate glasses for photonic applications // Journal of Luminescence. – 2023. – 263. – P. 120120.

Pokhodylo N.T. The Synthesis of Novel 7-(Substituted benzyl)-4,5-dihydro [1,2,3] triazolo [1,5-a] pyrazin-6 (7H)-ones via Tandem Ugi–Huisgen Reactions / N. T. Pokhodylo, M. A. Tupychak, E. A. Goreshnik, M. D. Obushak // Synthesis. – 2023. – Vol. 55, №6. – P. 977–988.

Бутенко С. Молекулярний дизайн та синтез карбазол/хромен-4-онів, поєднаних через феніленовий п-спейсер / С. Бутенко, М. Станіцька, Х. Піткович, І. Єфімов, М. Аксьонова, В. Кальмук, О. Скрипська, В. Соловійов, Ю. Горак, Р. Литвин // Вісник Львівського університету. Серія хімічна. – 2023. – 64. – С. 239–248.

Romaka V. V. Modeling of the properties of the semiconductor solid solution Lu_{1-x}V_xNiSb in the presence of magnetic ordering / V.V. Romaka, V.A. Romaka, Yu. Stadnyk, L. Romaka, A. Horyn, V. Pashkevych, P. Haraniuk // Phys. Chem. Solid State. – 2023. – Vol. 24, No. 3. – P. 503–508.

Стадник Ю. Дослідження властивостей напівпровідника n-TiNiSn, легованого донорною домішкою Nb / Ю. Стадник, Л. Ромака, А. Горинь, В. Ромака, П. Демченко, В. Пашкевич, П. Гаранюк // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. – 2023. – Вип. 64. – С. 120–127.

Нитка В. Електрохімічне гідрування сплавів на основі Tb₂Ni₇, легованих літєм та магнієм / В. Нитка, В. Кордан, І. Тарасюк, В. Павлюк // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. – 2023. – Вип. 64. – С. 136–146.

Rybak, N. Anthropogenic influence on the functioning of the Sukil riverbed / N. Rybak, L. Dubis // Проблеми геоморфології і палеогеографії Українських Карпат і прилеглих територій. – 2022. – Вип. 1 (14). – С. 147–159.

Віхоть Ю. М. Цифрове геологічне картування та аналіз польових геоданих інструментами та плагінами QGIS. / Ю. М.

Віхоть Ю. М. Особливості традиційного та цифрового геокартування під час польових досліджень та проведення практик у Карпатах / Ю. М. Віхоть, С. Я. Кріль // Проблеми геології України : збірник наукових праць / Відп. ред. М. М. Павлунь. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2023. – С. 59–61.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 255

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Іваськевич Оксана Ярославівна

Андрейків Олександр Євгенович (д. т. н., професор, член-кор. НАН України)

Бовгира Олег Вікторович (к. ф.-м. н., доц.)

Віхоть Юрій Михайлович (к. геол. н.)

Васильців Вячеслав Іванович (к. ф.-м. н.)

Гамерник Роман Васильович (к. ф.-м. н., с.д.)

Глосковська Наталія Вікторівна (к. ф.-м. н.)

Горинь Андрій Маркіянович (к. х. н., с.д.)

Гуран Ігор Йосипович (к. ф.-м. н., доц.)

Демків Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., проф.)

Дубіс Лідія Францівна (д. геогр. н., проф.)

Коваленко Марія Василівна (к. ф.-м. н., доц.)

Костюк Олександр Володимирович (к. геол. н.)

Кузь Ігор Степанович (к. ф.-м. н., доц.)

Кулініч Юрій Анатолійович (к. ф.-м. н.)

Кулик Юрій Орестович (к. ф.-м. н.)

Литвин Роман Зіновійович (к. х. н.)

Новосядлий Богдан Степанович (д. ф.-м. н., професор, член-кор. НАН України)

Обушак Микола Дмитрович (д.х.н., професор)

Павлик Богдан Васильович (д.ф.-м.н., професор)

Павлюк Володимир Васильович (д.х.н., професор)

Присяжний Андрій Григорович (к. т. н.)

Рибак Назар Б.

Словотенко Надія Олександрівна (к.геол.н.)

Станкевич Володимир Зенонович (д. ф.-м. н., доцент)

Тарасюк Іван Іванович (к. х. н.)

Шпотюк Ярослав Олегович (к. ф.-м. н., с.д.)

Керівник організації:

Мельник Володимир Петрович (д. філ. н., професор, член-кор.)

Керівники роботи:

Волошиновський Анатолій Степанович (д. ф.-м. н., професор)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.