Додаток 1 до Договору №\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

від « »\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2024 року про надання грантової підтримки

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи

Київського національного університету

імені Тараса Шевченка

Ганна ТОЛСТАНОВА

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

м.п

**ТЕХНІЧНЕ ЗАВДАННЯ**

**до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки на 2024 рік**

Розробка принципів створення та машинно-орієнтованої характеризації поруватих кремнієвих наноструктур з оптимальними теплотранспортними властивостями **(далі – Проєкт)**

(назва Проєкту)

**Назва конкурсу:** «Передова наука в Україні»

**Реєстраційний номер Проєкту**: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2023.03/0252\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Науковий керівник проєкту:** \_\_\_\_ асистент кафедри загальної фізики фізичного факультету \_\_\_\_\_\_\_КНУ імені Тараса Шевченка, канд. фіз.-мат. наук Павло ЛІЩУК\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Підстави для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок:**

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсупротокол від **«02» липня** 2024\_\_року № **22**

**1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ** (заповнюється відповідно до поданої заявки на одержання грантової підтримки, далі – заявка)

Короткий опис Проєкту (до 5000 знаків)

В епоху швидкого технологічного прогресу, який супроводжується мініатюризацією елементів сучасної електроніки, розвитком нових технологій джерел живлення, тощо, серйозним викликом стає зростання питомої теплогенерації в мікромасштабах, що вимагає ефективних рішень для відведення тепла чи створення теплових бар'єрів (теплового менеджменту). При цьому фундаментальна роль відводиться пошуку нових матеріалів, або способів модифікації вже існуючих матеріалів, що володітимуть оптимальними теплотранспортними характеристиками для вирішення заявлених проблем.

З іншого боку, обмеженість ресурсів викопного палива стимулює розвиток зеленої енергетики, одним з напрямів якої є напівпровідникова термоелектрика, де часткове вирішення екологічних та економічних проблем пов'язується із перетворенням надлишкового чи відпрацьованого тепла в електричну енергію. Однак, термоелектричні генератори на сьогодні характеризуються низькою ефективністю у порівнянні, наприклад, із сонячними елементами, що сковує їх виробництво та використання у промислових масштабах. Ключем до вирішення проблеми енергоефективності термоелектричних модулів є розробка нових матеріалів, здатних забезпечувати понижену теплопровідність при помірній електропровідності. Але взаємопов'язаність електро- і теплотранспортних характеристик матеріалів з одного боку, та потреба ресурсоємних і часозатратних досліджень для створення новітніх матеріалів, з іншого боку, наразі не привели до наукового прориву в цій галузі.

В останні роки з'явилися нові можливості для розробки новітніх матеріалів з оптимальними фізичними властивостями для прикладних застосувань завдяки розвитку методів машинного навчання. Зокрема, такі методи вже частково апробовані і для прогнозування теплотранспортних характеристик твердотільних структур. Однак, застосування алгоритмів машинного навчання для вирішення задач теплового менеджменту чи проблеми підвищення ефективності термоелектричного перетворення поки є обмеженим, а масштаб баз даних, пов'язаних із вказаними напрямами є набагато меншим, ніж в інших сферах.

Даний проєкт передбачає розширення інформаційної бази теплотранспортних характеристик напівпровідникових матеріалів та розробку наукового підґрунтя для машинно-орієнтованої оптимізації матеріалів із заданими характеристиками для застосувань в системах контролю теплових потоків чи термоелектричних перетворювачах. Об'єктом досліджень стануть кремнієві мультишарові пористі структури, що, з одного боку, є вдалими модельними матеріалами, в яких теплотранспортні властивості визначаються міжшаровими границями та морфологією пор, а з іншого – такі структури мають перспективи прикладних застосувань та просту інтеграцію з сучасною кремнієвою технологією. На першій стадії досліджень здійснюватиметься комп’ютерне моделювання процесів теплоперенесення в мультишарових структурах різної морфології, завдяки чому буде створено базу даних теплофізичних властивостей матеріалів та з'ясовано фізичні механізми теплового транспорту. Далі безпосередньо задіюватимуться методи машинного навчання для опрацювання накопичених результатів, їх аналізу та визначення оптимальних конфігурацій мультишарових структур, здатних ефективно розсіювати тепло в системах контролю теплових потоків чи здійснювати термелектричне перетворення в елементах зеленої енергетики.

Нарешті, проєкт передбачає експериментальну верифікацію результатів комп'ютерного моделювання та машинного навчання. Для цього будуть синтезовані мультишарові структури з параметрами, максимально близькими до передбачених машинно- орієнтованими алгоритмами, здійснено їх структурні, оптичні, теплофізичні та електричні дослідження. Такий комплексний характер проєктного дослідження дозволить отримати та розвинути нові знання про закономірності теплоперенесення в багатошарових структурах, а також налаштувати алгоритми машинного навчання для прогнозування теплотранспортних характеристик матеріалу з високою точністю. Передбачається, що використаний у роботі підхід, не обмежиться пошуком матеріалів для термоелектрики чи систем теплового менеджменту, але в перспективі може бути застосований для пошуку інших функціональних матеріалів з оптимальними параметрами.

Заявлена в проєкті актуальна наукова проблема буде розв'язуватися колективом виконавців, який включатиме провідних та молодих вчених. Це сприятиме розвитку дослідницького простору та конкурентностпроможності України, що повністю корелює з метою і тематикою конкурсу “Передова наука в Україні”. В роботі відсутні відомості, зміст яких становить державну таємницю (згідно з Законом України “Про державну таємницю”).

**Тривалість виконання Проєкту**

|  |  |
| --- | --- |
| **Початок, рік** | **2024** |
| **Завершення, рік** | **2026** |

**Тривалість виконання проміжного етапу Проєкту у 2024 році**

|  |  |
| --- | --- |
| Початок (відповідно до Календарного плану), місяць, рік: | 08,2024 |
| Завершення, місяць, рік: | 12,2024 |

**2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Загальна кількість авторів проєкту** | **З них** | | **Допоміжний персонал** |
| **Доктори наук** | **Кандидати наук** |
| 8 | 2 | 3 | 2 |

**3. ТЕМАТИЧНИЙ НАПРЯМ КОНКУРСУ ЗА ЯКИМ ЗДІЙСНЮЄТЬСЯ РЕАЛІЗАЦІЯ ПРОЄКТУ** (заповнюється відповідно до поданої заявки):

Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково технічного, соціально економічного, суспільно політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

**\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

**4. ОПИС ПРОЄКТУ** (заповнюється відповідно до поданої заявки)

**4.1. Мета Проєкту**(до 500 знаків)

Оптимізація теплотранспортних параметрів мультишарових структур пористого кремнію, призначених для використання в термоелектричних модулях чи системах контролю теплових потоків. Розробка методів створення та характеризації кремнієвих структур із заданими теплотранспортними властивостями на основі результатів комп’ютерного моделювання та машинного навчання, їх експериментальна верифікація.

**4.2. Основні завдання Проєкту** (до 1000 знаків)

1. Комп’ютерне моделювання впливу структурних параметрів мультишарового поруватого кремнію (МПК) на теплофізичні та електричні властивості, накопичення бази результатів для подальшої реалізації машинного навчання.

2. Атомістичне моделювання процесів теплового транспорту в МПК, встановлення фізичних механізмів теплоперенесення в МПК різної поруватості та якості інтерфейсів.

3. Налаштування експертних систем машинного навчання (МН) на основі штучних глибоких нейронних мереж та випадкового лісу, здатних передбачати теплові властивості МПК, навчених з використанням результатів комп'ютерного моделювання.

4. Визначення оптимальних конфігурацій МПК для ефективного перетворення енергії в термоелектричних елементах чи керування тепловими потоками за допомогою метаеврістичних алгоритмів та методів МН.

5. Синтез МПК із заданими кількістю шарів, їх товщиною та поруватістю. Перевірка результатів МН експериментальними методами дослідження теплофізичних і електричних властивостей синтезованих МПК.

**4.3. Детальний зміст Проєкту:**

- Сучасний стан проблеми  (до 2  сторінок)

Контрольований тепловий транспорт в матеріалах є визначальним фактором для низки сучасних технологій (Appl. Therm. Eng., 227, 120427 (2023); En. Stor. Mater., 65, 103144 (2024); Mat. Sci. and Eng.R: Rep., 151, 100700 (2022)). Насамперед, у зв'язку з екологічними та економічними причинами на сьогодні актуалізувалася проблема енергозбереження, пов'язана з утилізацією відпрацьованого тепла. Однак, напівпровідникові термоелектричні генератори, призначені для відновлення відпрацьованої енергії, характеризуються низькою ефективністю, чим суттєво обмежуються можливості їх виробництва та широкого використання (Therm. Sci. and Eng. Progr., 45, 102064 (2023)). Одним зі шляхів вирішення проблеми енергоефективності термоелектричних елементів є створення робочих напівпровідникових матеріалів, зокрема, наноструктур, з пониженою теплопровідністю при збереженні достатньо високої їх електропровідності (Mater. Tod., 66, 137 (2023)). Оскільки вказані параметри матеріалу взаємопов'язані, то така задача є нетривіальною і вимагає пошуку нових методів та способів для контрольованого впливу на процеси теплового транспорту в напівпровідникових структурах.

З іншого боку, тепловий менеджмент має фундаментальне значення для розвитку сучасної електроніки та оптотехніки, де невпинне збільшення густини активних елементів супроводжується різким зростанням теплової потужності (Renew. and Sust. Ener. Rev., 187, 113711 (2023); Mater. Tod., 17, 163 (2014)). Необхідність ефективного тепловідведення та створення теплових бар'єрів ставить перед дослідниками та конструкторами нові задачі з пошуку прогресивних матеріалів для таких потреб та способів керування тепловими потоками в них.

Вирішення описаних задач зазвичай потребує ресурсоємних та часозатратних експериментальних досліджень. Проте, останнім часом все ширше використовується підхід, який дістав назву інформатика матеріалів та передбачає поєднання вимірювання або розрахунок властивостей матеріалів з різноманітними алгоритмами інформатики, зокрема методами машинного навчання. Порівняно з традиційними процедурами дослідження матеріалів, які часто грунтуються на використанні методу проб та помилок, та є надзвичайно витратними, інформатика матеріалів відкрила нові можливості для суттєво здешевлення та прискорення процесів розробки, створення та впровадження нових систем з необхідними експлуатаційними характеристиками. Подібні підходи використовуються на сьогодні практично у всіх областях прикладної фізики, зокрема і при вивченні теплотранспортних властивостей матеріалів. Так, невеликий огляд на вказану тематику можна знайти в роботі Qian та Yang (Mat. Sci. Eng. R 146, 100642 (2021)). Серед багатьох методів, спрямованих на оптимізацію процесів перенесення тепла, на нашу думку, варто виділити декілька напрямків. Одним з них, який зарекомендував свою дієздатність, є поєднання молекулярно-динамічного моделювання та машинного навчання. Перша складова дозволяє детально розглядати атомні структури, включаючи дефекти та границі розділу, тоді як друга дозволяє узагальнити та розширити отримані результати (Appl. Phys. Lett. 121, 133501 (2022)) або підвищити точність розрахунків (наприклад, завдяки розрахунку міжатомних потенціалів – Mat. Today Phys. 10, 100140 (2019)). Іншим варіантом, який, зокрема, використовувався для досягнення ефективних теплотранспортних властивостей метаматеріалів з макроскопічними порами, є поєднання метаеврістичного алгоритму оптимізації з нейронною мережею (Appl. Phys. Lett. 122, 144102 (2023)). Але подібні комплексні дослідження перебуваються лише на зародковій стадії, тому потребують подальшого розвитку та експериментальної перевірки результатів комп'ютерного моделювання і машинного навчання, що частково буде реалізовано в представленому проєкті.

- Новизна Проєкту (до 1 сторінки )

Існуючі підходи до контрольованого теплового менеджменту в матеріалах ґрунтуються, як правило, на варіації одного з параметрів - геометричних розмірів структури (наприклад, довжини чи діаметру нанониток, товщини плівок), розміру чи концентрації наповнювача (наприклад, нановключень в композитах, нанопор в поруватих системах), якості інтерфейсів чи поверхонь в багатошарових структурах, дефектно-домішкового складу тощо. Однак, не всі пропоновані модифікації приводять до очікуваних ефектів, тоді як деякі інші виявляються не сумісними із технологіями синтезу напівпровідникових структур. Новизною даного проєкту є формування стратегії керованого теплотранспорту, яка передбачає одночасну варіацію не одного, а декількох параметрів матеріалу. На прикладі мультишарових структур пористого кремнію, що є вдалими модельними об'єктами, буде здійснено оптимізацію теплотранспортних характеристик шляхом варіації товщини шарів, їх кількості, ступеня поруватості, якості інтерфейсів. Передбачається, що в перспективі розроблені та апробовані в проєкті алгоритми будуть поширені на інші типи практично важливих матеріалів та наноструктур. Оскільки описана задача оптимізації включає систематизацію та аналіз значних масивів даних, її вирішення буде проводитися із застосування методів машинного навчання, що також є одним із елементів новизни. Крім того, новизною проєкту стане апробація потенціалів машинного навчання при дослідженні теплового транспорту в мультишарових структурах методами молекулярної динаміки. Також варто наголосити на комплексній парадигмі проєкту, що включатиме повний цикл досліджень з поєднанням потужних методів комп’ютерного моделювання для накопичення даних та дослідження фізичних процесів в структурах, алгоритмів машинного навчання для вирішення задачі оптимізації теплового менеджменту в матеріалі та сукупності експериментальних методик для синтезу, характеризації мультишарових структур і перевірки результатів моделювання та машинного навчання. Зазначимо, що в рамках експериментальних досліджень буде вивчено не лише теплотранспортні, але й їх електрофізичні параметри структур, що є особливо важливим для термоелектричних перетворювачів. Саме ці складові новизни проєкту у поєднанні з комплексним підходом до вирішення поставлених задач дозволять отримати нові знання про закономірності теплоперенесення в багатошарових структурах та налаштувати алгоритми машинного навчання для прогнозування їх теплотранспортних характеристик з високою точністю.

- Методологія дослідження (до 2 сторінок)

Методологія пропонованого проєкту поєднує декілька напрямів досліджень. Перший з них передбачає комп'ютерні симуляції процесів теплового транспорту в мультишарових пористих структурах з різними товщинами шарів, поруватістю, якістю інтерфейсів тощо. Виконання симуляцій буде реалізовано як з використанням атомістичного (метод молекулярної динаміки), так і континуального (метод скінченних елементів) підходів. В результаті проведення таких досліджень буде накопичено інформаційну базу значень теплофізичних параметрів мультишарових структур для подальшого машинного навчання та з'ясовано фізичні механізми впливу параметрів структури на теплотранспортні характеристики матеріалу.

Другий напрям досліджень полягатиме в реалізації машинного навчання з метою виокремлення мультишарових структур з найкращими конфігураціями для застосувань в термоелектричних модулях чи системах теплового контролю. В межах проєкту передбачено налаштування систем машинного навчання задля оптимізації їхньої ефективності. У випадку глибоких нейронних мереж буде проведено підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методів регуляризації та початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів, типу активаційної функції, швидкості навчання, кількості використаних епох, розміру партії для одночасного оновлення параметрів (batch size). Для моделей випадкового лісу та градієнтного бустингу будуть розглянуті різні варіанти для кількості дерев та їхньої глибини, кількості ознак, які використовуються при розщепленні, та зразків, які можуть бути як у листовому, так і внутрішньому вузлах; а також доцільність бутстрапу. Під час налаштування будуть використані методи випадкового пошуку на початкових етапах та сіткового і баєзіанного на кінцевих. Орієнтовні інструменти роботи з глибокою нейронною мережею, випадковим лісом та градієнтним бустингом - пакети Keras та sklearn.ensemble.

В проєкті передбачено використання метаеврістичних алгоритмів для визначення оптимальних параметрів мультишарових систем на основі пористого кремнію. Відповідно до No Free Lanch теореми не існує універсального метаеврістичного методу для вирішення всіх оптимізаційних задач. Тому будуть розглянуті можливості щодо вирішення вказаної задачі низки алгоритмів, а саме DE, EBLSHADE, ADELI, NDE, MABC, TLBO, GOTLBO, STLBO, PSO, IJAYA, ISCA, NNA, CWOA, WW. Порівняння ефективності буде проведено з використанням методів непараметричної статистики.

Третій напрям досліджень включатиме синтез мультишарових структур з параметрами, отриманими в результаті машинного навчання, а також експериментальний аналіз їх структури, теплових, електричних та оптичних параметрів. В рамках цього напряму буде вдосконалено методику синтезу мультишарових пористих структур для одержання матеріалів із заданими параметрами. Структура та морфологія синтезованих матеріалів буде встановлена комплексними дослідженнями за допомогою рентгенівської дифрактометрії (XRD), сканувальної зондової мікроскопії (SEM) та оптичної мікроскопії. З використанням методів фототермоакустики буде реалізовано вимірювання теплофізичних параметрів зразків.

- Інформація про наявну матеріально-технічну базу, обладнання та устаткування, необхідні для виконання Проєкту (до 1 сторінки)

Виконання завдань проєкту буде реалізовано на базі наявної матеріально-технічної бази, обладнання та устаткування, що міститься на балансі КНУ імені Тараса Шевченка і включає:

1) Устаткування для проведення рентгеноструктурного дослідження матеріалів - рентгенівський дифрактометр ДРОН-4-07 з температурною камерою для досліджень структури моно- та полікристалічних зразків в діапазоні температур 100 – 450 К.

2) Установки для фотоакустичних та фототермічних методів діагностики теплофізичних властивостей структур: генератори Tektronix, лазери (УФ – ІЧ діапазон) з підтримкою TTL модуляції, синхронний нановольтметр Unipan 232b, осцилограф Tektronix, тощо.

3) Комплекс вимірювання електричних характеристик: джерело-вимірювач постійного струму Keithley 2450, прецизійний мультиметр Keithley DMM6500 та LRC вимірювач Sourcetronic ST2829C;

4) Обчислювальні потужності для виконання ресурсоємних розрахунків, проведення машинного навчання, обробки та візуалізації отриманих результатів.

5) Обладнання для синтезу поруватих кремнієвих наноструктур: програмоване джерело постійного струму PWS4323, комірка для електрохімічного травлення; ваги Radwag AS220/C та оптичний мікроскоп Axio Observer A1M Carl Zeiss.

- Очікувані  результати виконання Проєкту (до 1 сторінки ):

а) Опис наукової або науково-технічної продукції, яка буде створена в результаті виконання Проєкту (із зазначенням її очікуваних якісних та кількісних (технічних) характеристик).

В результаті виконання проєкту очікується така наукова продукція:

- систематизована база результатів комп'ютерних симуляцій для аналізу теплового транспорту в мультишарових поруватих структурах та машинного навчання;

- фізичні механізми впливу параметрів мультишарових структур на процеси теплового транспорту;

- налаштовані моделі машинного навчання (глибока нейронна мережа, випадковий ліс, градієнтний бустинг) для оцінки теплотранспортних властивостей мультишарових структур пористого кремнію;

- вдосконалена методика синтезу кремнієвих мультишарових поруватих наноструктур з контрольованими параметрами (ступінь поруватості, середній розмір пор, товщина шарів);

- підготовка не менше 5 статей, включаючи публікації у журналах квартилю Q1 та/або Q2;

- підготовка не менше 4 доповідей на конференціях міжнародного рівня.

б) Обґрунтування переваг очікуваної наукової або науково-технічної продукції порівняно з аналогами, що існують, на підставі порівняльного аналізу.

Отримана інформаційна база щодо аналізу теплового транспорту в поруватих структурах буде значно ширшою в порівнянні з існуючими аналогами. Запропоновані удосконалення методики синтезу дозволять підвищити контрольованість товщини та параметрів поруватості мультишарових кремнієвих структур. Створені експертні системи на основі машинного навчання та визначені оптимальні конфігурації мультишарових структур дозволять проєктувати подібні системи зі значними ресурсними (час розрахунку, необхідність експериментального дослідження) перевагами.

в) Обґрунтування практичної цінності запланованих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства.

Реалізація проєкту сприятиме 1) розвитку професійних навичок та отриманню нових компетентностей молодими вченими, які складають третину авторського колективу; 2) поширенню комбінованих (експеримент - комп’ютерна симуляція - інформаційні алгоритми) методів наукового дослідження; 3) отриманню фундаментальних знань щодо процесів теплового транспорту у поруватих системах.

- Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці (до 1 сторінки).

Перспективи використання результатів проєкту в суспільній практиці пов'язані з двома основними технологічними напрямами: 1) розробка матеріалів для ефективного теплового менеджменту в елементах сучасної електроніки та оптотехніки, де важливим є створення матеріалів з аномально низькою чи, навпаки, аномально високою теплопровідністю; 2) розвиток систем альтернативної енергетики, зокрема, термоелектрики, де однією з ключових проблем є пошук методів і способів підвищення ефективності енергоперетворення напівпровідникових елементів. Можливим вирішенням вказаної проблеми вважається модифікація робочого матеріалу для зниження його теплопровідності без суттєвих змін електропровідності. Однак, експериментальне розв'язання задач щодо пошуку матеріалів із заданими теплофізичними параметрами є трудомістким, дороговартісним та часозатратним. Тому пропоноване в проєкті дослідження на основі поєднання комп'ютерних симуляцій, машинного навчання та експериментальної перевірки результатів дозволить суттєво прискорити та здешевити пошук матеріалів з необхідними параметрами для теплового менеджменту чи термоелектричних застосувань. Отримані результати можуть стимулювати розробку методів оптимізації термоелектричних модулів на основі кремнію, а також підґрунтям для створення ефективних теплових бар’єрів чи тепловідводів в елементах кремнієвої мікро- і наноелектроніки.

**5. НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ, ЯКІ ОЧІКУЄТЬСЯ ОТРИМАТИ У 2024 РОЦІ** (до 2 сторінок)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**5.1. Заплановані наукові або науково-технічні результати, які очікуються отримати в рамках  проміжного етапу виконання Проєкту:**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **№ з/п** | **Індикатори виконання** | **Заплановано  (відповідно до КП),**  **кількість** |
| **1.** | **Публікація результатів:** |  |
| 1.1. | Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних: |  |
| - Scopus та/або Web of Science Core Collection, всього, од. |  |
| з них із квартилем Q1 i Q2 на момент опублікування, од. |  |
| з них із квартилем Q3 i Q4 на момент опублікування, од. |  |
| 1.2. | Статті у наукових журналах (без квартилю), збірниках наукових праць, матеріалах конференцій тощо, що індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection (крім тих, що увійшли до п.1.1) , од. |  |
| 1.3. | Статті у фахових виданнях України категорії «Б» , од. |  |
| 1.4. | Статті у періодичних виданнях інших країн, що мають ІSSN, од. |  |
| 1.5. | Публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях, що не включені до переліку наукових фахових видань України та не індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection, од. |  |
| 1.6. | Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) у закордонних видавництвах іноземними мовами, од. |  |
| 1.7. | Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) в українських видавництвах, од. |  |
| 1.8. | Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) з обмеженим доступом (для проєктів оборонного та/або подвійного призначення) , од.’ |  |
| 1.10 | Словники, довідники, енциклопедії, видані українськими та/або закордонними видавництвами , од. |  |
| 1.12 | Інші публікації, які не описані у пп. 1.1-1.10, од. |  |
| 2. | **Презентація та дисемінація результатів:** |  |
| 2.1. | Міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції, од. |  |
| 2.2. | Всеукраїнські та регіональні науково-технічні/промислові виставкові заходи, од. |  |
| 2.3. | Представлення розробки/бізнес-плану/результатів проєкту на: |  |
| - інноваційних фестивалях, од. |  |
| - конкурсах стартапів, од. |  |
| - акселераційних програмах, од. |  |
| - хакатонах, од. |  |
| 2.4. | Науково-популярні публікації з метою поширення інформації про результати проєкту для загальної (широкої) аудиторії, од. |  |
| 2.5. | Представлення інформації про результати проєкту на науково-популяризаційних заходах (Дні науки, Наукові пікніки тощо) , од. |  |
| 2.6. | Інші заходи, які не описані у пп. 2.1-2.5, од. |  |
| **3.** | **Охоронні документи на об’єкти права інтелектуальної власності (ОПІВ)** |  |
| 3.1. | Отримано патентів України на винахід, од. |  |
| 3.2. | Отримано свідоцтв України на промисловий зразок , од. |  |
| 3.3. | Отримано патентів України на корисну модель, од. |  |
| 3.4 | Отримано охоронний документ на ОПІВ інших країн, од. |  |
| 3.5 | Інші ОПІВ, які не описані у пп. 3.1-3.4, од. |  |
| 3.6 | Подано заявок на отримання охоронного документу на ОПІВ України та /або інших країн, од. |  |
| **4.** | **Впровадження та використання наукових або науково-практичних результатів:** |  |
| 4.1. | Підписання (укладання) договорів (угод) на впровадження (використання) результатів проєкту (окрім індивідуальних), серед них: |  |
| 4.1.1 | Господарських договорів/контрактів, од./тис.грн. |  |
| 4.1.2 | Ліцензійних договорів/договорів на ноу-хау, од./тис.грн. |  |
| 4.1.3 | Грантових угод, од./тис.грн. |  |
| 4.1.4 | Інші договори (угоди), які не описані у пп. 4.1.1-4.1.3, од./тис.грн. |  |
| 4.4 | Документально підтверджено використання результатів у практиці органів державної/місцевої влади, суспільних практиках тощо, од. |  |
| 4.5 | Проведено маркетингові дослідження, перемовини з потенційними замовниками із підписанням протоколу (меморандуму, угоди) про наміри комерційного впровадження результатів, од. |  |
| 4.6 | Подано заявок на державні, міжнародні наукові гранти (окрім індивідуальних) , од. |  |
| **5.** | **Створено чи істотно удосконалено/покращено існуючі:** |  |
| 5.1. | Пристрої (макет, експериментальний/дослідний зразок) , од. |  |
| 5.2. | Матеріали, процеси, технології, технологічні регламенти, цифрові продукти та електронні сервіси, од. |  |
| 5.3. | ТУ, ДСТУ, будівельні норми, зареєстровані проєкти законодавчих актів, од. |  |
| 5.4. | Наукові (науково-технічні) послуги, од. |  |
| 5.5 | Іншу продукцію, яка не описана у пп. 5.1-5.4, од. |  |

**5.2. Опис наукової та/або науково-технічної продукції, яка буде створена в результаті виконання проміжного етапу Проєкту (із зазначенням її очікуваних якісних та кількісних (технічних) характеристик). Обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами.**

В результаті виконання проміжного етапу передбачається

5.2.1 Підготовка набору програмних кодів для моделювання теплоперенесення в мультишарових пористих структурах; до переваг набору відноситься його орієнтація саме на пористі мультишарові структури;

5.2.2. Отримання величин коефіцієнтів теплопровідності кремнієвих структур різної пористості, розраховані з різними потенціалами міжатомної взаємодії; аналогів не існує;

5.2.3. Створення обмеженого (початкового) набору розрахованих теплотранспортних параметрів модельованих пористих кремнієвих структур; результуюча інформаційна база буде значно ширшою в порівнянні з існуючими аналогами;

5.2.4. Підготовлений звіт про виконану роботу, яка є оригінальною.

**5.3. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання проміжного етапу Проєкту в суспільній практиці.**

Перспективи використання результатів проєкту в суспільній практиці пов'язані з двома основними технологічними напрямами: 1) розробка матеріалів для ефективного теплового менеджменту в елементах сучасної електроніки та оптотехніки, де важливим є створення матеріалів з аномально низькою чи, навпаки, аномально високою теплопровідністю; 2) розвиток систем альтернативної енергетики, зокрема, термоелектрики, де однією з ключових проблем є пошук методів і способів підвищення ефективності енергоперетворення напівпровідникових елементів. Можливим вирішенням вказаної проблеми вважається модифікація робочого матеріалу для зниження його теплопровідності без суттєвих змін електропровідності. Однак, експериментальне розв'язання задач щодо пошуку матеріалів із заданими теплофізичними параметрами є трудомістким, дороговартісним та часозатратним. Тому пропоноване в проєкті дослідження на основі поєднання комп'ютерних симуляцій, машинного навчання та експериментальної перевірки результатів дозволить суттєво прискорити та здешевити пошук матеріалів з необхідними параметрами для теплового менеджменту чи термоелектричних застосувань. Отримані результати можуть стимулювати розробку методів оптимізації термоелектричних модулів на основі кремнію, а також підґрунтям для створення ефективних теплових бар’єрів чи тепловідводів в елементах кремнієвої мікро- і наноелектроніки.

**5.4. Практична цінність запланованих результатів реалізації проміжного етапу Проєкту для науки, економіки та суспільства.**

Проєкт передбачає проведення фундаментальних досліджень.

Технічне завдання до Проєкту із виконання наукових досліджень і розробок не повинно містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування.

|  |  |
| --- | --- |
| Науковий керівник Проєкту  \_\_\_\_асистент кафедри загальної фізики фізичного факультету КНУ імені Тараса Шевченка\_\_  (посада)  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_Павло ЛІЩУК\_\_\_  (підпис) (Власне ім’я та ПРІЗВИЩЕ) | ПОГОДЖЕНО:  Перший заступник виконавчого директора з питань грантової підтримки Грантонадавача  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  (підпис) (Власне ім’я та ПРІЗВИЩЕ)  Начальник управління грантового забезпечення Грантонадавача  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  (підпис) (Власне ім’я та ПРІЗВИЩЕ)  Начальник відділу \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ управління грантового забезпечення Грантонадавача  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  (підпис) (Власне ім’я та ПРІЗВИЩЕ)  Головний спеціаліст відділу \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ управління грантового забезпечення Грантонадавача  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  (підпис) (Власне ім’я та ПРІЗВИЩЕ) |
|  |