Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U000181

Державний реєстраційний номер: 0115U000320

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-01-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження кінетичних залежностей для накопичення структурних дефектів в алюмінієвих сплавах під дією реакторного опромінення та порівняння їх з експериментальними даними

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Південноукраїнський державний педагогічний університет ім. К.Д.Ушинського

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (048)723-40-98 , (048) 732-51-03

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 105.02

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Покращення радіаційної стійкості Al сплавів, що використовуються як реакторні матеріали

Назва роботи англійською:

Radiation resistance of Al alloys in conditions of the irradition in nuclear reactor

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: Al сплави як реакторні матеріали. Мета дослідження: розробити метод довгострокового прогнозу радіаційної стійкості Al сплавів при реакторному опроміненні. Методи дослідження та апарат: розроблено спеціальну модифікацію методу класичної молекулярної динаміки (МД), за допомогою якої виявляється можливим визначати внесок певного інтервалу енергетичного спектру інцидентних частинок в остаточний радіаційний ефект. Теоретичні і практичні результати: розроблено комп'ютерну програму на основі методу МД для моделювання утворення радіаційних дефектів по механізму потужних зіткнень у матеріалах з істотно різними масами атомів (на прикладі сплаву U-Al). Визначено, що в певних інтервалах енергій частинок, які падають, можливе утворення "важких кластерів", тобто кластерів, що складаються з важких атомів (U-кластерів у U-Al сплавах). Знайдено залежність швидкості утворення "важких кластерів" від співвідношення мас атомів кристала. Для вивчення радіаційно-індукованих процесів в обраному діапазоні енергетичного спектру частинок, які падають, модифіковано МД підхід шляхом впровадження "шокової функції" FSH, яка визначає величину сили, що діє на атоми кристалічної решітки. Для імітації імпульсів, що передаються атомам решітки при опроміненні введено випадкову функцію, яка визначає, який атом обирається для удару із опроміненої множини, величину енергії удару із обраного енергетичного інтервалу та напрямок удару. Проаналізовано модельні результати іонного бомбардування трьохатомного модельного кристала у певному інтервалі енергій випромінювання, що дозволяє прогнозувати особливості формування важких кластерів у різних інтервалах енергетичного спектру інцидентних частинок. Новизна, ефективність впровадження: запропонований новий алгоритм МД дозволяє виявити окремий внесок падаючих частинок в обраному інтервалі енергетичного спектру до кінцевого радіаційно-індукованого структурного пошкодження кристала. У порівнянні з відомими алгоритмами (Ейлера, Верле, Рунге-Кутта та ін.) запропонований нами модифікований алгоритм Верле дозволяє одержувати більш детальну інформацію щодо механізмів радіаційного дефектоутворення. Цей алгоритм застосовано при вивченні процесів утворення структурних дефектів внаслідок пружних зіткнень у трьохатомному та двохатомному модельних кристалах, в яких атомні маси компонентів істотно відрізняються. Отримані результати мають загальний характер і можуть бути використані при інтерпретації різних експериментів по радіаційному опромінюванню складних сполук, які представляють більшість реакторних матеріалів.

Реферат англійською:

Object of research: Al alloys as reactor materials. Aim of research: to develop a method of the long-term prognosis of the radiation resistance of Al alloys under reactor irradiation. Research methods and apparatus: Modified algorithm of Molecular Dynamics (MD), computer modeling, computer experiment. Theoretical and practical results: The modification of classical MD method is developed. This MD modification is applied for investigation of radiation effects in materials in which atomic masses are significantly differed. To solve the problem the so called "shock function" is introduced to Verlet algorithm. The formation of "heavy clusters" (HC) is observed in such crystals (the example is U-Al alloy). Two specific functions that were introduced to MD program allowed investigating HC formation in certain intervals of energy spectrum of incident ions. Novelty and effectiveness: In comparison with known algorithms (Euler, Runge-Kutta etc.) modified algorithm Verlet gives more detailed information regarding mechanisms of radiation defects formation. We used this algorithm for investigation of processes of HC formation in triatomic and diatomic crystals. The obtained results can be used for interpretation

of experimental results connected with irradiation of compounds that model most of reactor materials.

Індекс УДК: 621.039.5.002.2, 675.055.2+661.862+621.039.53

Коди тематичних рубрик: 58.33.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ків Арнольд Юхимович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Зондування за допомогою молекулярної динаміки енергетичного спектру частинок в радіаційно- стимульованих процесах

Назва НТП англійською: Molecular Dynamics probing of the energy spectrum of particles in radiation stimulated processes

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 - дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблена модифікація молекулярної динаміки відкриває нові можливості для дослідження механізмів радіаційного дефектоутворення в складних сполуках, зокрема в реакторних матеріалах. Показано, що за допомогою моноенергетичного іонного пучка можна цілеспрямовано створювати певні дефектні структури в багатоатомних кристалах. Ці результати можуть бути використані в трековій електроніці. Властивості трекових пристроїв залежать від форми треків та електронної структури внутрішніх поверхонь треків. Такі необхідні властивості треків можна отримати за допомогою запропонованого підходу.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 2017-2020 роки
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: ВНЗ, наукові установи

Перспективні ринки: Україна та за кордоном

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 0
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**
- **Наявність бізнес-плану:**
- **Техніко-економічне обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 0
- **Очікуваний термін окупності (років):** -
- **Додаткова інформація:** --

IX. Бібліографічний опис

1. Molecular Dynamics probing of the energy spectrum of particles in radiation stimulated processes / A. Kiv, N. Mykytenko, D. Fuks, I. Dahan, L. Meshi // International Journal of Advanced Computer Technology. - 2015. - Vol.

4(6). - P.81-86. 2. Abrupt symmetry decrease in the ThT2Al20 alloys (T = 3d-transition metal) / A. Kiv, A. Uziel, A. I. Bram, A. Venkert, D. Fuks, L. Meshi // Journal of Alloys and Compounds. - 2015. - Vol. 648. - P. 353-359. 3. Kiv A. Computer modelling of ion current pulsations in track-containing foils / N. Mykytenko, D. Fink, A. Kiv // Journal of Computational Science. - 2015. - Vol. 6. - P. 34-39. 4. The nature of oscillations of ion currents in the ion track electronics / D. Fink, A. Kiv, Y. Shunin, N. Mykytenko, T. Lobanova-Shunina, A. Mansharipova // Computer Modelling & New Technologies. - 2015. - Vol. 19 (6). - P. 7-13. 5. Coupled chemical reactions in dynamic nanometric confinement: IV. Ion transmission spectrometric analysis of nanofluidic behavior and membrane formation during track etching in polymers / D. Fink, J. Vacik, V. Hnatowicz, G. Munoz H, H. Garcia Arellano, A. Kiv, L. Alfonta // Radiation Effects and Defects in Solids. - 2015. - Vol. 170 (3). - P.155-174, DOI: 10.1080/10420150/2014.984298 6. Микитенко Н. О. Новий підхід у використанні молекулярної динаміки для дослідження радіаційних процесів / Н. О. Микитенко //Фізика і хімія твердого тіла. - 2015. - т. 16, № 3, С. 453-457. 7. Ків А. Ю. Автоматизація методу кореляційної селекції перовскітів / А. Ю. Ків, Н. О. Микитенко, Д. Фукс // Вісник Черкаського університету. Серія: фізико-математичні науки. - 2015. - № 16 (349). - с. 9-16. 8. Kiv A. New MD approach in molecular dinamics/ A. Kiv, N. Mykytenko, D. Fuks, I. Dahan, L. Meshi // Modern Materials Science: international conf., May 2015. - Ariel University, Israel, 2015. 9. Kiv A. New MD approach for research the radiation defects in solids / N. Mykytenko, T. Maximova, A. Kiv, I. Donchev, I. Kelesh // Інформаційні технології та моделювання в економіці: міжнар. наук.-практ. конф., 20-22 травня 2015р. : тези доп. - Черкаси, 2015. - С.7-8. 10. Kiv A. Jeans instability and hydrodynamic roots of Landau damping / A. Ershkovich, A. Kiv // Computer Modelling & New Technologies. - 2016. - Vol. 20 (1). - P. 21-22. 11. Kiv A. Correlation Selection of Perovskites with Optimal Parameters / N. Mykytenko, A. Kiv, D. Fuks. // Adv. Mater. Lett. - 2016, 7(4). - P. 10-15. 12. Nuclear track-based biosensing: an overview / Dietmar Fink, Gerardo Munoz Hern?ndez, Humberto Garcia Arellano, Jiri Vacik, Vladimir Havranek, Vladimir Hnatowicz, Arnold Kiv, Lital Alfonta // Radiation Effects and Defects in Solids. - 2016. - № 171. - P. 173-185. 13. On the simultaneous etching of two neighboring swift heavy ion irradiated polymer foils / D. Fink, A. Kiv, S. Cruz, G. Munoz // Information Technologies, Management and Society, ISMA University, Riga. - 2016, P. 27-28. 14. Kiv A. Perspectives of track electronics / A. Kiv, I. Donchev, I. Kelesh // Modern problems of semiconductors: intern. conf., 2016, Drogobych, Ukraine. 15. Микитенко Н. О. Оптимізація фізичних і службових характеристик перовскітних та полімерних трекових наноструктур : дис. ... канд. фіз-мат. наук : 01.04.07 / Микитенко Наталія Олександрівна; Держ. закл. "Південноукр. нац. пед. ун-т ім. К. Д. Ушинського". - Одеса, 2016. 16. Ordered U(Al, Si)3 phase: Structure and bonding / V. Y. Zenou, G. Rafailov, I. Dahan, A. Kiv, L. Meshi, D. Fuks // Journal of Alloys and Compounds. - 2017. - Vol. 690. - P. 884-889.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Чебикін Олексій Якович

Перелік осіб-виконавців

Дончев І.І.

Ків А.Ю.

Праведна Н.П.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності