Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U005259

Державний реєстраційний номер: 0125U002835

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Комп'ютерне моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в стопі Fe-Cr-Ni за умов опромінення важкими іонами

Початок етапу: 07.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380542223760, 380542222794

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 130.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в полікристалі Fe-Cr-Ni за умов нейтронного та іонного опромінення

Назва роботи англійською:

Modeling of radiation-induced segregation in Fe-Cr-Ni polycrystal under neutron and ion irradiation.

Реферат українською:

Здійснено моделювання розподілу концентрацій вакансій та міжвузельних атомів в полікристалі □-Fe за умов нейтронного та іонного опромінення. Досліджено вплив температури та міжзеренних меж на профілі концентрацій точкових дефектів. Вдосконалено модель радіаційно-індукованої сегрегації на випадок опромінення важкими іонами стопу Fe-Cr-Ni. Проведено числове моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в стопі Fe-20Cr-8Ni за умов опромінення іонами Fe при різних значеннях температури та часу опромінення. Проведено порівняння концентраційних профілів компонентів в стопі Fe-20Cr-8Ni за умов іонного та нейтронного опромінення. Методом функціоналу густини проведено моделювання електронної та позитронної густин для суперкомірок Fe-Cr-Ni. з різною конфігурацією дефектів вакансійного типу. Проведено аналіз зміни форми отриманих ізоповерхонь відносно змін електронної густини довколишнього міжвузлового простору суперкомірки. Результати призначені для моделюванні й прогнозуванні змін локального складу в стопі Fe-Cr-Ni, які виникають за умов іонного опромінення, а також для пояснення результатів модельних експериментів на важких іонах.

Реферат англійською:

The distribution of vacancy and interstitial atom concentrations in □-Fe polycrystal under neutron and ion irradiation was simulated. The influence of temperature and grain boundaries on the point defects concentration profiles was investigated. The model of radiation-induced segregation was improved for the case of irradiation of the Fe-Cr-Ni alloy with heavy ions. Numerical simulation of radiation-induced segregation in the Fe-20Cr-8Ni alloy under irradiation with Fe ions at different temperatures and irradiation times was performed. The concentration profiles of components in the Fe-20Cr-8Ni alloy under ion and neutron irradiation conditions were compared. The density functional method was used to simulate the electron and positron densities for Fe-Cr-Ni supercells with different configurations of vacancy-type defects. The analysis of the change in the shape of the obtained isosurfaces relative to changes in the electron density of the surrounding interstitial space of the supercell was carried out. The results are intended for modeling and predicting changes in the local composition in the Fe-Cr-Ni alloy that occur under ion irradiation conditions, as well as for explaining the results of model experiments on heavy ions.

Індекс УДК: 621.039.5.002.2, 621.039.53

Коди тематичних рубрик: 58.33.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Скороход Роман Володимирович

Науковий ступінь: д.філософ

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Вдосконалена модель радіаційно-індукованої сегрегації для стопів Fe-Cr-Ni за умов опромінення важкими іонами.

Назва НТП англійською: An improved model of radiation-induced segregation for Fe-Cr-Ni alloys under heavy ion irradiation.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: 72.19. Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В моделі радіаційно-індукованої сегрегації для стопів Fe-Cr-Ni за умов іонного опромінення враховано неоднорідну по глибині швидкість продукування точкових дефектів та імплантовані атоми, які додатково впливають на перерозподіл компонентів сплаву.

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

Вплив НТП на довкілля: не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Скороход Р.В., Коропов О.В. Моделювання радіаційно-підсиленої дифузії в полікристалі □-Fe за умов іонного опромінення//XXV Всеукраїнська школа-семінар молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 30–31 жовтня 2025 р. – С. 22.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Лебедь Олександр Анатолійович
д. ф.-м. н., 01.04.02, 104

Перелік осіб-виконавців

Бистрик Юрій Сергійович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Крикля Сергій Володимирович

Скороход Роман Володимирович
(д.філософ, д.філософ, 104, 104)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Ворошило Олексій Іванович

Телефон

0995099634

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна