Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033509

Державний реєстраційний номер: 0121U108687

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Кінетика рівноважних та нерівноважних фазових перетворень і хімічних реакцій в гетерогенних конденсованих системах. Дослідження впливу довготривалої релаксації структури скла при низьких температурах (нижче температури склування) на процес зародження кристалічної фази

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 14312223

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 1, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61108, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380573353530, 380573351688, 380573356425

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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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.): 6040.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Теорія фазових перетворень, кінетичних і дифузійних явищ в конденсованих середовищах

Назва роботи англійською:

A theory of phase transformations, kinetic and diffusion phenomena in condensed media

Реферат українською:

Досліджені дифузійні процеси і фазові перетворення за участю хімічних реакцій у неоднорідних середовищах. Врахувались ефекти пам'яті в дифузії та їх вплив на взаємодію рівноважних і нерівноважних фазових перетворень. Знайдено, що для позитивної швидкості фронту фазового перетворення, коли стан з більшим значенням концентрації поширюється, як прикладене поле, так і в'язкість (тобто наявність диссипації) у загальному випадку зменшують поправки пам'яті. Для негативної швидкості самоузгодженість моделі накладає більш сильні обмеження на дозволений інтервал значень параметрів. Для опису сильно гетерогенних систем за допомогою рівняння Кана-Хілліарда стандартна форма термодинамічного потенціалу з постійним коефіцієнтом при градиентному члені й поліномом четвертого ступеня може бути недостатньою. Розглянута модифікація форми термодинамічного потенціалу з поліномом шостого ступеня й квадратичній залежності коефіцієнта при градиентному члені. Отримані точні розв'язки у вигляді статичної хвилі, що біжить, і умови їх існування залежно від симетрії потенціалу. Досліджена взаємодія між структурною релаксацією та кінетикою кристалізації нижче температури склування Tg на прикладі модельного силікатного скла 5BaO□8SiO2 Аналізуючи кількість кристалів, їх розмір і кристалізований об’єм як функції часу обробки, продемонстровано, що тільки один параметр, який враховує структурну релаксацію, ефективно описує ці три параметри кристалізації. Виявлено, що скла, схильні до швидкої кристалізації нижче Tg, можуть повністю кристалізуватися до досягнення повної структурної релаксації. Ці результати вказують на складну взаємодію між динамікою релаксації та кристалізацією в глибоко переохолоджених стеклах, що має наслідки для розуміння та контролю цих процесів у різних матеріалах.

Реферат англійською:

We investigated diffusion processes and phase transformations involving chemical reactions in heterogeneous media, taking into account memory effects in diffusion and their influence on the interaction of equilibrium and nonequilibrium phase transformations. It was found that for a positive velocity of the phase transformation front, when the state with a higher concentration value propagates, both the applied field and the viscosity (i.e., the presence of dissipation) generally reduce the memory corrections. For a negative velocity, the self-consistency of the model imposes stronger restrictions on the allowed interval of parameter values. The standard form of the thermodynamic potential with a constant coefficient in the gradient term and a fourth-degree polynomial may be insufficient to describe highly heterogeneous systems using the Cahn-Hilliard equation. A modified form of the thermodynamic potential with a sixth-degree polynomial and a quadratic dependence of the coefficient in the gradient term is considered. The exact solutions in the form of a static traveling wave and the conditions of their existence depending on the symmetry of the potential are obtained. The interaction between structural relaxation and crystallization kinetics below the glass transition temperature Tg is studied using the example of a model silicate glass 5BaO□8SiO2. By analyzing the number of crystals, their size, and crystallized volume as a function of the processing time, it is demonstrated that only one parameter that takes into account structural relaxation effectively describes these three crystallization parameters. It is found that glasses prone to rapid crystallization below Tg can completely crystallize before achieving full structural relaxation. These results indicate a complex interaction between relaxation dynamics and crystallization in deeply supercooled glasses, which has implications for understanding and controlling these processes in various materials.

Індекс УДК: 531.4, 531.4, [536.425+538.93+537.874]:538.911

Коди тематичних рубрик:30.15.41

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Бакай Олександр Спепанович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Модель впливу структурної релаксації на кінетику кристалізації нижче температури склування силікатного скла 5BaO▫8SiO2

Назва НТП англійською: A model of the effect of structural relaxation on crystallization kinetics below the temperature of vitrification of the 5BaO▫8SiO2 silica glass

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: К 73.10.0 Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджена взаємодія між структурною релаксацією та кінетикою кристалізації нижче температури склування Tg на прикладі модельного силікатного скла 5BaO▫8SiO2. Аналізуючи кількість кристалів, їх розмір і кристалізований об'єм як функції часу обробки, продемонстровано, що тільки один параметр, який враховує структурну релаксацію, ефективно описує ці три параметри кристалізації. Виявлено, що стекла, схильні до швидкої кристалізації нижче Tg, можуть повністю кристалізуватися до досягнення повної структурної релаксації. Ці результати вказують на складну взаємодію між динамікою релаксації та кристалізацією в глибоко переохолоджених стеклах, що має наслідки для розуміння та контролю цих процесів у різних матеріалах.

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

Вплив НТП на довкілля:

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

1. Macena G. S., Abyzov A. S., Fokin V. M., Nascimento M. L. F., Zanotto E. D., Ferreira E. B. Diffusion zone evolution around growing crystals in combeite glass. J. American Ceramic Society, 107 (2024) 2185-2195; https://doi.org/10.1111/jace.19569 Q1

2. Rodrigues, L.R.; Abyzov, A.S.; Fokin, V.M.; Acosta, M.H.R.; Nascimento, M.L.F.; Davydov, L.N.; Zanotto, E.D. Unveiling Crystallization and Relaxation Dynamics Interplay in a Deeply Supercooled Glass. Scripta Materialia, 246 (2024), 116085; https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2024.116085 Q1

3. Bezuglyj A.I. and Davydov L.N. Phonon heat removal from metal nanoparticles and dynamics of nanoparticle cooling at low temperatures. New Journal of Physics, 26 (2024) 033011. https://doi.org/10.1088/1367-2630/ad2f69 (Open access). Q1

4. Mchedlov-Petrosyan P.O. and Davydov L.N. Cahn-Hilliard model with Schlögl Reactions: interplay of equilibrium and non-equilibrium phase transitions. II. Memory effects, 2024, arXiv: http://arxiv.org/abs/2408.13633 , Submitted to Cond. Mat. Phys.

5. Alekseechkin N. V. Thermodynamic theory of curvature-dependent surface tension: Tolman's theory revisited, Langmuir, 40 (2024) 6834-6846. https://doi. org/10.1021/acs. langmuir.3c03747 Q1

6. Poluektov Yu. M., Soroka A. A. To the theory of phase transition of a binary solution into an inhomogeneous phase, Phase Transitions. 97 (2024) 417-431. https://doi. org/10.1080/01411594.2024.2352460 Q3. arXiv:2303.06405 [cond-mat. stat-mech], Q3

7. Poluektov Yu. M., Soroka A. A. On the thermodynamics of two-level Fermi and Bose nanosystems, Optical and Quantum Electronics – 2024. – V. 56(8). – P. 1349. https://doi.org/10.1007/s11082-024-07266-x arXiv:2405.02427v1 [quant-ph], Q2

8. Poluektov Yu. M., Soroka A. A. Thermodynamics of the Fermi gas in a cubic cavity of an arbitrary volume. arXiv: https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.03667 [quant-ph]

9. Poluektov Yu. M., Soroka A. A. Thermodynamic functions of the Fermi gas at arbitrary temperatures. arXiv: https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.16332 [cond-mat. quant-gas].

10. Borysenko O., Bratchenko M., Lukin I., Luhanko M., Omelchenko I., Sotnikov A., Lomi A. Application of Langevin Dynamics to Advance the Quantum Natural Gradient Optimization Algorithm. arXiv:2409.01978. https://doi. org/10.48550/arXiv.2409.01978. Submitted to Quantum.

11. Lazarev M., Banhart J. A concept of local coordination number for the characterization of solute clusters within atom probe tomography data, Microscopy and Microanalysis, 30 (2024) 793–806. https://doi.org/10.1093/mam/ozae074 Q3

12. L. R. Rodrigues, A. S. Abyzov, V. M. Fokin, M. H.R. Acosta, M. LF. Nascimento, L. N. Davydov, E. D. Zanotto. Unveiling crystallization and relaxation dynamics interplay in a deeply supercooled glass. Scripta Materialia 246 (2024) 116085. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2024.116085 Q1

13. Mchedlov-Petrosyan, P.O., Davydov, L.N., Osmayev, O.A., Higher order potential in the modified convective-viscous Cahn-Hilliard equation, 2024, http://arxiv.org/abs/2412.03156 [cond-mat,.mtrl-sci]

14. A.A. Turkin, S. Sabooni1, L.Q. Lu, R.J. Westerwaal, E. Zoestbergen, Y.T. Pei, Modeling of phase transformations in Zn-Mg coatings during annealing, submitted to Journal of Alloys and Compounds, 2024.

15. Macena G. S., Abyzov A. S., Fokin V. M., Nascimento M. L. F., Zanotto E. D., Ferreira E. B., Evolution of diffusion zone around crystals growing in a combeite stoichiometric glass and its effect on the local nucleation rate, 13th International Symposium in Crystallization in Glasses and Liquids, 24-27 September 2024, Orléans, France.

16. Borysenko O. Application of Langevin dynamics for machine learning and optimization tasks. IV International Conference “Condensed Matter & Low-Temperature Physics”, June 3-7, 2024 (Online). Book of Abstracts, p. 224. https://www. ilt. kharkov. ua/cmltp2024/doc/Book_of_Abstracts_2024.pdf

17. Borysenko O., Bratchenko M., Lomi A., Omelchenko I., Sotnikov A. Application of Langevin dynamics for optimization in machine learning tasks. Bogolyubov Kyiv Conference ”Problems of Theoretical and Mathematical Physics”, dedicated to the 115-th anniversary of the outstanding theoretician in physics and mathematics Mykola Bogolyubov. 24-26 September 2024, Kyiv, Ukraine. Book of Abstracts, p.54. https://indico.bitp.kiev.ua/event/13/book-of-abstracts.pdf

18. Kotlyar V. V. Polarization observables in production of four bottom quarks in electron - positron annihilation. Доповідь на Науковій конференції Інституту ядерних досліджень НАНУ за підсумками 2023 року. Київ, 27-31 травня 2024 р. http://www.kinr.kiev.ua/Annual_Conferences/KINR2024a/programm_kinr2024-1b-nuclear_theory.pdf

19. Котляр В. В. Народження чотирьох боттом кварків в анігіляції електронів та позитронів. Тези доповідей XXII Конференції з фізики високих енергій та ядерної фізики, с. 16. ННЦ ХФТІ, Харків, 2024. https://www.kipt.kharkov.ua/conferences/ihepnp/2024/XXII_abstracts_ua.pdf

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Шульга Микола Федорович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Абизов Олександр Сергійович
(д. ф.-м. н.)

Алєксєєчкін Микола Васильович
(к. ф.-м. н.)

Бакай Олександр Степанович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Безуглий Олексій Іванович
(к. ф.-м. н.)

Борисенко Олександр Олексійович
(к. ф.-м. н.)

Давидов Леонід Миколайович
(к.ф.-м.н., 01.04.02)

Котляр Володимир Вікторович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Лаврова Галина Миколаївна
(к. ф.-м. н.)

Лазарєв Микола Павлович
(к. ф.-м. н.)

Мчедлов-Петросян Петро Отарович
(к. ф.-м. н.)

Полуектов Юрій Матвійович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Сорока Олексій Олександрович
(к. ф.-м. н.)

Степановський Юрій Петрович
(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Туркін Анатолій Аркадійович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Чечкін Олексій Вікторович
(д. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Борисенко О. О.

Телефон — +38 (057) 335-62-03

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

