Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U007752

Державний реєстраційний номер: 0112U003495

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-12-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження еволюції меж зерен (зокрема, нерівноважних меж зерен) у пересичених твердих розчинах і двофазних сплавах. Теорія та експеримент

Початок етапу: 06.2012

Закінчення етапу: 12.2012

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0472354463 , 0472354463

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

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): 2209020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 65

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження еволюції меж зерен (зокрема, нерівноважних меж зерен) у пересичених твердих розчинах і двофазних сплавах. Теорія та експеримент

Назва роботи англійською:

Investigation of the grain boundary evolution (in particular, non-equilibrium grain boundaries) in the supersaturated solid solutions and two-phase alloys. Theory and experiment

Реферат українською:

У роботі вперше розроблена атомістична модель утворення нерівноважної межі зерен шляхом періодичного локального плавлення випадково вибраних ділянок вихідної межі. Асимптотично досяжна надлишкова енергія межі прямо пропорційна кореню квадратному з частоти збурень. Узагальнена теорія фазових переходів розтікання і змочування. При розгляді нуклеації на ребристих поверхнях вперше знайдена можливість фазового переходу одновимірного розтікання вздовж потрійного стику інтерфейсів і меж зерен. За допомогою вимірювання температур переходу від неповного змочування меж до повного на полі- і бікрісталлах вперше вдалося експериментально оцінити ширину і місце спектру енергій меж нахилу в повному спектрі енергій меж зерен у полікристалах. Виявилося, що всі межі нахилу становлять всього 5-10% повного спектру енергій меж зерен у полікристалах. Узагальнена теорія дифузійної конкуренції фаз на випадок росту фази шляхом потоків вздовж рухомих інтерфейсів. Вперше знайдені критерії кінетичного пригнічення нуклеації фази Cu3Sn1 у випадках дифузії через об'єм і через інтерфейси. Середньо-польову модель нелінійної дифузії Мартена-Ерделі-Беке узагальнено для моделювання росту фаз на тривимірних гратках. При наявності сильної дифузійної асиметрії в ОЦК решітці впорядкована фаза A1B1 зароджується при концентраціях, які є далекими від стехіометричних. При впорядкуванні спершу з'являється порядок (частково впорядкована структура), а вже потім фаза впорядковується повністю за рахунок додаткового притоку речовини і, як наслідок, наближення концентрації до стехіометричної. Наявність асиметрії призводить до утрудненого зародкоутворення і росту одних фаз, і, навпаки, прискореного для інших. Інкубаційний час для найповільнішої фази в залежить від асиметрії експоненційно. Ріст впорядкованих фаз може відбуватися в осциляційному режимі.

Реферат англійською:

An atomistic model of the nonequilibrium grain boundaries generated by repeating local melting (perturbations) of randomly selected clusters has been developed output limits. Asymptotically achievable excess energy limit is directly proportional to the square root of perturbations frequency. The theory of spreading and wetting phase transitions has been generalized: considering nucleation on rough surface we found (for the first time) an opportunity of phase transition of one-dimensional spreading along the triple junction interfaces and grain boundaries. By measuring the temperature of transition from partial wetting boundaries to full wetting in poly- and bicrystalls we managed (for the first time) to experimentally evaluate the width and place of inclination boundaries energy in the full spectrum of energies of grain boundaries in polycrystals. It turned out that inclination boundaries represent only 5-10% of the full range of energies of grain boundaries in polycrystals. Theory of diffusive phase competition has been generalized for the case of phase growth by flow along the moving interface. We found criteria of kinetic inhibition of phase Cu3Sn1 nucleation in cases of diffusion through the volume and through interfaces. Mean-field model of nonlinear diffusion in Martin-Erdelyi-Beke approach has been generalized for modeling of phase growth on three-dimensional lattices. In the presence of strong diffusion asymmetry in the bcc lattice ordered phase A1B1 was born at concentrations that are far from stoichiometric. In these simulations we observed at first ordering and after that - reaching of necessary composition. The presence of asymmetry leads to poor nucleation and growth of some phases, and, conversely, acceleration of others. The

incubation time for the slowest phase depends on the asymmetry exponentially. Growth of ordered phases can occur in oscillation mode.

Індекс УДК: 539.2;538.9-405;548, 539.219.3

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гусак Андрій Михайлович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теорія еволюції меж зерен (зокрема, нерівноважних меж зерен) у пересичених твердих розчинах і двофазних сплавах

Назва НТП англійською: Theory of the grain boundary evolution (in particular, non-equilibrium grain boundaries) in the supersaturated solid solutions and two-phase alloys

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: K73.10 - Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук, M80.30 - Вища освіта, M80.22.0 - Професійно-технічна освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У науково-дослідній роботі та циклі статей за її результатами створені теорії та моделі зародкоутворення та міграційних процесів на міжфазних межах, на стиках меж зерен з поверхнею плівок. Вперше створена атомістична модель нерівноважних меж зерен. Вперше отримані критерії одновимірного розтікання на ребристих інтерфейсах та критерії пригнічення проміжних фаз у моделі ДІГМоподібного росту.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2012 - 2015 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Інститути НАНУ та РАН

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 2000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація: по договору

IX. Бібліографічний опис

1. Б. Б. Страумал, П. В. Проценко, А. Б. Страумал, А. О. Родин, Ю. О. Кучеев, А. М. Гусак, В. А. Мурашов. Место границ наклона в полном энергетическом спектре границ зерен в поликристалле. Письма ЖЭТФ, 96 (2012)

№9, pp 651-656. 2. Yu. O. Kucheev, A. B. Straumal, I. V. Mogil'nikova, B. B. Straumal, A. M. Gusak, B. Baretzky. Wetting of Grain Boundaries in Hard_Magnetic Nd-Fe-B Alloys. Russian Journal of Non_Ferrous Metals, 2012, Vol. 53, No. 6, pp. 450-456. 3. Andriy M. Gusak, Guido Schmitz, Nadiya Tyutyunnyk. Flux Driven Nucleation at Interfaces During Reactive Diffusion. Defect and Diffusion Forum . 323-325 (2012) pp 55-60. 4. N.V. Tyutyunnyk, A.N. Gusak. Role of non-equilibrium vacancies in spinodal decomposition. Ukr. J. Phys. 2012. Vol. 57, No. 6, p. 629-636. 5. Запорожець Т. В., Гусак А. М., Подолян О. М., // Эволюция пор в нанооболочках - конкуренция прямого и обратного эффектов Киркендалла, эффектов Френкеля и Гиббса-Томсона (феноменологическое описание и компьютерная симуляция) // Успехи физики металлов -2012, №1, с. 1-70. 6. Запорожець Т. В., Подолян О. М., Гусак А. М. / Модель стягування бінарних порожнистих нанооболонок / Металлофизика и новейшие технологии. - 2012. - Т. 34, № 1. - С. 111-121. 7. Осташевська О. А., Запорожець Т. В. / Осциляційний режим ВСС-реакцій у мультишарових плівках / Металлофизика и новейшие технологии. - 2012. - Т. 34, № 3. - С. 367-376. 8. Запорожец Т. В., Гусак А. М., Устинов А. И. / Моделирование стационарного режима реакции СВС в нанослойных материалах (феноменологический подход). 2. Сравнительный анализ одно- и двухстадийной реакций / Современная электрометаллургия. - 2012. - №3(108). - С. 38-47. 9. N.V. Storozhuk , K.V. Sopiga, A.M. Gusak. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion. Philosophical Magazine (2012) DOI:10.1080/14786435.2012.746793. 10. V.V. Turlo , A.M. Gusak, K.N. Tu (2012): Model of phase separation and of morphology evolution in two-phase alloy, Philosophical Magazine,DOI:10.1080/14786435.2012.747011 11. A.M. Gusak, A.O. Kovalchuk, B.B. Straumal. Interrelation of depletion and segregation in decomposition of nanoparticles. Philosophical Magazine. - accepted (є коректура) 12. Подолян О. М., Запорожець Т. В., Гусак А. М. / Еволюція пор при реакційній дифузії у радіально симетричних наночастинках (феноменологія у рамках місткової моделі) / Український фізичний журнал. - 2012 (прийнято до друку, є корректура) 13. Гусак А.М., Сторожук Н.В. Конкуренция К- и F-стоков в порообразовании. Физика металлов и металловедение. 2013, №3 (прийнято до друку, вже зроблена корректура) 14. SM Eich, M Kasprzak, A Gusak, G Schmitz. On the mechanism of diffusion-induced recrystallization: Comparison between experiment and molecular dynamics simulations - Acta Materialia, Volume 60, Issue 8, May 2012, Pages 3469-3479. 15. T. Tian, A.M.Gusak, O.Yu. Liashenko, J.K.Han, D.Choi, K.N. Tu, A New Physical Model for Life Time Prediction of Pb-free Solder Joints in Electromigration Tests, Proceedings of ECTC conference, San Diego, California, USA, DOI: 10.1109/ECTC.2012.6248915 ,2012, Pages: 741-746.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Кузьмінський Анатолій Іванович

Перелік осіб-виконавців

Гусак Андрій Михайлович

Запорожець Тетяна Василівна

Ковальчук Андрій Олександрович

Король Ярослав Дмитрович

Ляшенко Олексій Юрійович

Ляшенко Юрій Олексійович

Пасічний Микола Олександпрович

Сопіга Костянтин Володимирович

Сторожук Надія Вікторівна

Турло Владислав Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

