Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0209U001867

Державний реєстраційний номер: 0106U004021

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-03-2009

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вплив нерівноважних дефектів на кінетику наноструктурних перетворень

Початок етапу: 01.2006

Закінчення етапу: 12.2008

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський державний університет ім.Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0472)471220

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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:

Джерела фінансування

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив нерівноважних дефектів на кінетику наноструктурних перетворень

Назва роботи англійською:

Influence of non-equilibrium defects on the kinetics of nanostructural transformations

Реферат українською:

Основні наукові результати: (1) Розробка теорії та створення комп'ютерних моделей утворення і колапсу порожнистих нанооболонок. З'ясовані особливості конкуренції ефектів Френкеля, Кіркендала, оберненого ефекту Кіркендала, ефекту Гібса-Томсона в названих процесах. Показано, що пороутворення мусить бути пригнічене капілярним ефектом Гіббса-Томсона у надто малих частинках. Вперше побудовані теоретична і Монте-Карло моделі, які самоузгоджено моделюють кінетику як утворення, так і колапсу нанооболонок. (2) Розробка теорії спінодального розпаду з урахування нерівноважних вакансій. Вперше показано, що при дуже істотних відмінностях між рухливостями компонентів найбільш імовірний період ламелярниї структур повинен бути суттєво більшим, ніж той, що передбачається загальновизнаною теорією Кана-Хіліарда. (3) Розробка теорії та створення комп'ютерних моделей коалесценції при розпаді пересичених розчинів із врахуванням обмеженої ефективності джерел і стоків вакансій. Показано, що на проміжній стадії коалесценції нанозернистого сплаву, коли відстань між зернами менше довжини вільного пробігу вакансій, закон росту середніх розмірів і розподіл зерен за розмірами суттєво відрізняються від класичного закону Ліфшиця-Сльозова-Вагнера. (4) Розробка теорії та створення комп'ютерних моделей росту і конкуренції проміжних інтерметалевих фаз при пропусканні постійного електричного струму через контактну зону двох металів. Врахування процесів реакції на границях для таких систем є необхідним. Нерівноважні вакансії забезпечують механізм, за допомогою якого система частково компенсує (або точніше послаблює) зовнішній вплив на неї: якщо електричний струм сприяє росту фази, то нерівноважні вакансії сповільнюють його, якщо ж струм перешкоджає росту фази то - підтримують цей ріст. (5) Розробка загальних термодинамічних критеріїв прогнозування шляхів еволюції багатофазних систем. Приведено обґрунтування використання принципу максимальності швидкості вивільнення потенціалу Гіббса для систем, вибір шляху еволюції яких неоднозначний. Уході аналізу розглянуті приклади застосування принципів термодинаміки необоротних процесів у задачах: 1) пошуку критерію вибору першої фази та критерію початку росту другої фази при реакційній дифузії на прикладі конкуренції росту проміжних фаз у системі NiSi, 2) вибору оптимальних режимів вирівнювання дифузійних потоків при довільних розподілах і потужностях джерел і стоків вакансій; 3) взаємної дифузії в двохфазних областях потрійних систем. (6) Розробка теорії та створення комп'ютерних моделей коміркового розпаду і дифузійно індукованої міграції меж з урахуванням балансу та екстремальності виробництва ентропії.

Реферат англійською:

Main results: (1) Theory and software for modeling of formation and collapse of hollow nanoshells. Peculiarities of competition between Frenkel, Kirkendall, inverse Kirkendall, Gibbs-Thomson effects are found. Void formation can be suppressed by capillary effect in too small particles. Phenomenological and Monte Carlo models are proposed, which self-consistently describe theformation as well as shrinkage of nanoshells. (2) Theory of spinodal decomposition with account of nonequilibrium vacancies. If diffusivities of components differe very significantly, then the most probable interlamellar spacing should be larger than that predicted by well-known Cahn-Hilliard theory. (3) Theory and software for modeling of coarsening stage of decomposition with account of limited efficiency of sinks and sources. At the intermediate stage of coarsening, when the mean istance between precipitates is less than the mean free path for vacancies, the growth law for mean size and the particle size distributions differ significantly from LSW predictions. (4) Theory and software for modeling of phase growth and

competition under strong current via the contact zone of two metals. Account of reactions at interfaces is necessary. Nonequilibrium vacancies provide mechanism for partial compensation (damping) of external influence: if current assists the phase growth then nonequilibrium vacancies suppress it; if current suppresses phase growth then vacancies help it. (5) General thermodynamic criteria of predicting the evolution paths for multiphase systems. Criterion of maximal Gibbs free energy release rate was applied for 1) first phase to grow choice and second phase growth criterion at the example of NiSi system , 2) choice of optimal regime of interdiffusion at limited efficiency of vacancy sinks and sources, 3) interdiffusion in two-phase zones. (6) Theory and software for modeling of cellular precipitation and diffusion induced grainboundary migration with account of extremal principles.

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)

IX. Бібліографічний опис

1. Jong-ook Suh, K.N.Tu, G.V.Lutsenko, A.M.Gusak, Size distribution and morphology of Cu6Sn5 scallops in wetting reaction between molten solder and copper, Acta Materialia, 56 (2008), 1075-1083. 2. A. A. Kodentsov, A. Paul, M. J. H. van Dal, Cs. Cserh?ati, A. M. Gusak,F. J. J. van Loo, On the Spatial Stability and Bifurcation of the Kirkendall Plane during Solid-State Interdiffusion, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 33 (2008), p.p.210-233. 3. А.М.Гусак. Термодинамика необратимых процессов - глава в энциклопедии "Неорганическое материаловедение", под ред. Г.Г.Гнесина и В.В.Скорохода, Институт проблем материаловедения НАН Украины, с.с. 239-260 (2008) 4. M.Pasichny, A.Gusak, Model of Lateral Growth Stage during Reactive Phase Formation, Defect and Diffusion Forum, v. 277 (2008), pp.47-52. 5. A.Kovalchuk, D.Gertsricken, A.Gusak, V.Mazanko, Models of Mutual Solubility Increasing under he influence of Pulse Loading, Defect and Diffusion Forum, v. 277 (2008), pp.69-74. 6. G.V.Lutsenko, A.M.Gusak, Composition Fluctuations in the Ostwald Ripening, Defect and Diffusion Forum, v. 277 (2008), pp.1187-192. 7. Lyashenko Y.O. Suppression Criterion of the Phase Growth Based on Extremal Principles of Nonequilibrium Thermodynamics, Defect and Diffusion Forum, Vols. 277 (2008) pp. 35-42 8. Т. В. Запорожець. Вплив кривизни на вакансійну підсистему нанооболонок. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 141, с. 105-113 (2008) 9. А.М. Гусак, О.М. Подолян. ОБЕРНЕНИЙ ЕФЕКТ КІРКЕНДАЛА В МОДЕЛІ ДИФУЗІЙНОЇ ПОВЗУЧОСТІ. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 141, с. 101-104 (2008) 10. A.M.Gusak, KN.Tu. Thermomigration in two-phase structures. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 117, с. 12-22 (2007) 11. A.M.Gusak, I.Sobchenko, G. Schmitz, D. Baither LATERAL GRAIN GROWTH DURING NANOFILM DEPOSITION. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 117, с. 51-57 (2007) 12. Ляшенко Ю.О., Помойницький В.А. Моделювання твердофазних реакцій в системі Ni-P-Sn, Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 117, с. 73-88 (2007) 13. Z.Gan, A.M.Gusak, W.Shao, Zhong Chen, S.G.Mhaisalkar, T. Zaporozhets, K.N.Tu, "Analytical modeling of reservoir effect on electomigration in Cu interconnects," J.Mater.

Res., 22, 152-156 (2007). 14. W. Shao, S. G. Mhaisalkar, T. Sritharan, A. V. Vairagar, H. J. Engelmann, O. Aubel, E. Zschech, A. M. Gusak, and K. N. Tu, "Direct evidence of Cu/cap/liner edge being the dominant electromigration path in dual damascene Cu interconnects," Appl. Phys. Lett., 90, 052106 (2007). 15. A.M.Gusak, S.V.Kornienko, G.V.Lutsenko, Nonequilibrium vacancies in nanosystems. Defects and Diffusion Forum, Vol. 264(2007), pp109-116. 16. Gusak A.M, Lyashenko Yu.A. Принцип максимальности производства энтропии при выборе пути эволюции диффузионно-взаимодействующих систем. Ч. I. Общая схема и применение к твердофазным реакциям (029.07) Journal of Functional Materials (in Russian, Moscow), #5 (2007), 170 17. Gusak A.M, Lyashenko Yu.A. Принцип максимальности производства энтропии при выборепути эволюции диффузионно-взаимодействующих систем. Ч. II. Проблема взаимной диффузии (036.07) Journal of Functional Materials (in Russian, Moscow), #6 (2007), p. 210 18. Gusak A.M, Lyashenko Yu.A. Принцип максимальности производства энтропии при выборе пути эволюции диффузионно-взаимодействующих систем. Ч. III. Диффузия в двухфазных зонах (044.07) Journal of Functional Materials (in Russian, Moscow), #7 (2007), 250 19. Гладка Л.І., Ляшенко Ю.О. Чисельна модель дифузійної гомогенізації потрійної двохфазної системи. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 114, с. 73-88 (2007) 20. С.В.Корнієнко, А.М.Гусак. Фазоутворення при електроміграції. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 114, с. 11-38 (2007) 21. І.В.Собченко. Кінетична модель Монте-Карло руху нанопор. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 114, с. 56-64 (2007). 22. Ю.О.Ляшенко. Критерій пригнічення росту фази в потрійный системы на основі принципу максимальності ентропії. Вісник ЧУ, серія фізико-математичні науки, випуск 114, с. 47-55 (2007) 23. I. Sobchenko, J. Pesicka, D. Baither, et al., Philosophical Magazine, v.87, 2427 (2007) 24. Fan-Yi Ouyang, K. N. Tu, Yi-Shao Lai, and Andriy M. Gusak, "Effect of entropy production on microstructure change in eutectic SnPb flip chip solder joints by thermomigration." Appl. Phys. Lett., 89, 221906 (2006). 25. Gusak, A.M., G.V. Lutsenko, and K.N. Tu, Ostwald Ripening with Non-equilibrium Vacancies. Acta Materialia, v.54, #3 (2006) pp.785-791. 26. Lyashenko Y.O., Gusak A.M. DIGM - Entropy balance and free energy release rate, Defect and Diffusion Forum 249: 81-90 (2006). 27. A. Huang, AM Gusak, KN Tu, and Yi-Shao Lai, Thermomigration in SnPb composite flip chip solder joints, Appl. Phys. Lett., 88, 141911 (2006). 28. I. Sobchenko, J. Pesicka, D. Baither, et al., Applied Physics Letters, v. 89, 133107 (2006) 29. C.F.Goh, Z.H.Gan, S.G.Mhaisalkar, F.Y.C.Boey, A.M.Gusak, P.S.Teo, Modeling of smoothening effect on morphologies of annealed submicron nickel particles used for electrically conductive adhesives, Journal of Applied Physics, v.100, 084302 (2006) 30. Gan Z.H., Shao W., Mhaisalkar S.G., Chen Z, Li H.,Tu K.N., Gusak A.M. Reservoir effect and the role of low current density regions on electromigration lifetimes in copper interconnects, JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 21 (9): 2241-2245 (2006)5490

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Кузьмінський Анатолій Іванович

Перелік осіб-виконавців

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

