Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0312U003158

Державний реєстраційний номер: 0109U002546

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-02-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка теорії фазоутворення при механічному контакті нанодротинок (із застосуванням до утворення моносиліцидів нікеля і пластини)

Початок етапу: 01.2010

Закінчення етапу: 12.2010

Вид звітного документа: Без звіту

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: (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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 102.04

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив поверхневих реакцій на фазоутворення і структурну еволюцію наносистем

Назва роботи англійською:

Influence of surface reactions on phase transformaions and morfology evolution in the nanosystems

Реферат українською:

1. Запропоновано математичні моделі, які дозволяють одержати теоретичні уявлення про механізм та кінетику росту оксиду на поверхні тонких плівок в умовах дії "кисневого насосу". При низьких температурах відпалу реалізується режим насосу, який визначається дифузією вздовж потрійних стиків границь зерен, а при високих - дифузією в об'ємі оксиду. 2. Розроблена модель точкової реакції між нанодротинками кремнію і нанодротинками або наночастинками нікелю Описана кінетика росту моносиліциду з періодами очікування заростання атомних площин; періоди очікування корельовані в часі, що повинно давати відхилення від стандартного пуасонівського розподілу цих часів. 3. Створено нову теорію та моделі зародкоутворення у відкритих системах, у тому числі у при поверхневих шарах та на інтерфейсах з урахуванням дивергенції зовнішніх потоків. . 4. Побудована теорія і комп'ютерні моделі утворення, росту і колапсу порожнистих нанотрубок, Показано, що в залежності від співвідношення радіуса і ядра і оболонки, всередині наноциліндра може утвориться як ланцюжок ізольованих пор із подальшим їх колапсом, а може і перколяційний кластер пор, який переходить у циліндричну пору, теж із подальшим колапсом. 5. Створенні нові моделі реакцій синтезу, що самопоширюється, у тонкій мультишаровій фользі, з урахуванням поверхневих ефектів і нерівноважних вакансій.

Реферат англійською:

1. Mathematical models enabling to understand the mechanism and kinetics of oxide growth at the thin films surfaces under "oxygen pump", are suggested. For various ratio of grin-boundary, bulk and interface "metal-oxide" diffusivities, one can determine the time of reaching the maximal oxide size (thickness) and then, taking into account the grain sizes, predict the time of continuous oxide layer formation at the surface. It is established that the diffusion mechanism influences substantially the shape and size of an oxide layer (in particular, on its effective thickness). Influence of the Mass-transfer parameters on the effective growth exponent has been analyzed. Regularities of the oxide growth for 4 diffusion regimes are found. They demonstrate that at low temperatures an oxygen pump regime is realized by diffusion along triple junctions of the grain boundaries, and at high temperatures - by the bulk diffusion in the oxide. 2. The following model of point contact reaction between silicon nanowires and nickel nanowires or nanoparticles has been elaborated: a) surface diffusion along external surface of silicon nanowire wit distributed sink due to penetration of metal atoms into wire bulk through the nanometric oxide layer; b) formation of the first monosilicide nucleus outside the mechanical contact region; c) "stop-and-go" epitaxial growth of monosilicide along nanowire by fast lateral filling of each new atomic layer leading to depletion of nickel interstitial atoms solution in silicon and respectively, to long waiting time necessary for reanimation of concentration super-saturation via the point contact; d) waiting periods are correlated in time, and this should lead to deviation of waiting time distribution from Poissonian one. 3. New theory FDN (Flux Drive Nucleation) is suggested, as well as models of nucleation in open systems (including surface layers and interfaces) are suggested: Solid state reactions start with formation of nuclei of the product phases. Divergence of external fluxes appears to be essential for nucleation. This influence is expressed in terms of the 5-th or 4-th power of size term in the effective Gibbs potential of nucleation. Characteristic size of diffusion spot around mechanical contact point could be even larger the wire diameter. It explains why a) silicide nucleate outside the contact point, b) why the phase NiSi grows instead of common Ni2Si c) why the average growth velocity is not decreasing with time. 4. Surface reaction of the nanoparticles and nanowires leading to formation and collapse of hollow nanoshells, have been

modeled as one "life cycle", taking into account Kirkendall, Frenkel, Gibbs-Thomson effects. Percolation transition of voids in nanowirews is predicted 5. Surface influence on the SHS reaction in multilayers is modeled for Ni-Al system. The threshold of reaction initiation by side thermal flux is found for first time. Slowing down and acceleration of SHS reaction by non-equilibrium defects is described for the first time.

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. Gusak A. M, T.V. Zaporozhets, Yu.O. Lyashenko, S.V. Kornienko, M.O. Pasichnyy and A.S. Shirinyan. Diffusion-controlled Solid State Reactions: in Alloys, Thin-Films and Nanosystems. - Berlin: Wiley-VC, 2010. - 476p. 2. A.O. Kovalchuk, A.M. Gusak, and King Ning Tu, Theory of repeating nucleation in point contact reactions between nanowires// Nano Letters, 10 (2010) p.4799-4806. 3. T.V.Zaporozhets, A.M.Gusak, A.I Ustinov. SHS reactions in nanosized multilayers - analytic model versus numeric model. International Journal of SHS, 2010, vol. 19, no. 4. 4. A.M. Gusak, F. Hodaj, G. Schmitz: Flux-driven nucleation at interfaces during reactive diffusion, Philosophical Magazine Letters, (2011), Vol.91, №9, P. 610-620. 5. A.M. Gusak, F. Hodaj & T.V. Zaporozhets: Thermodynamics of void nucleation in nanoparticles, Philosophical Magazine Letters, (2011), 1-10. 6. F. Hodaj, O. Liashenko, A. Gusak & Y. Lyashenko: Heterogeneous nucleation and depletion effect in nanowire growth, Philosophical Magazine, (2011) 1-12. 7. A.M. Gusak, A.O. Kovalchuk, K. N. Tu. Diffusion in Point Contact Reaction. Defect and Diffusion Forum, v. 309-310 (2011), p.143-148. 8. T.V. Zaporozhets, A.M. Gusak. Role of Finite Vacanvy Relaxation Rate at SHS Reactions in Nanosized Multilayers. Defect and Diffusion Forum, v. 309-310 (2011), p.215-222. 9. Gusak A.M., Tyutyunnyk N.V., Tu K.-N. Models of interdiffusion in a polycrystalline alloy. Defect and Diffusion Forum, v. 309-310 (2011), p.135-142. 10. Oleshkevych A.I., Gusak A.M., Sidorenko S.I., Voloshko S.M., The Modeling of Oxide Growth Process on the Surface during the Diffusion in Thin Films under Conditions of "Oxygen Pump" Action // Ukrainian Journal of Physics 2010, Vol.55, N 9, p.1004-1012 11. А.М. Гусак, О.М. Подолян, "Модель початкової стадії росту проміжної фази з сильною концентраційною залежністю коефіцієнта дифузії" // Металлофизика и новейшие технологи - 2010 -т.32, №5 - с.1001-1009. 12. Ковальчук А.О., Гусак А.М. Реакції у нанодротинках при точковому контакті у системі метал-кремній // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. - 2009. - Т. 7. - Вип. 4. - С. 1163-1175. (вийшло щойно в 2010 році) 13. О. М. Подолян, Т. В. Запорожець, Формування і стягування порожнин у нанодротинках. Український фізичний журнал Т.56, №9, стр. 933-943 14. F.Hodaj, A.M.Gusak, B.B.Straumal. Nucleation in open nanosystems - recent history and perspectives. Вісник ЧУ, серія фіз.-мат.науки, №185 (2010), с. 30-39. 15. Т. В. Запорожец, Моделирование стационарного режима распространения реакции СВС в нанослойных материалах. Двухстадийная реакция. Вісник ЧУ, серія фіз.-мат.науки, №185 (2010), с. 17-29. 16. A.M.Gusak, K.N.Tu, N.V.Tyutyunnyk. Backstress versus Kirkendall shift in diffusion and electromigration. Вісник ЧУ, серія фіз.-мат.науки, №185 (2010), с. 94-100.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Кузьмінський Анатолій Іванович

Перелік осіб-виконавців

Гладка Л.І.

Грицаєнко Ю.

Дорошенко І.

Запорожець Т.В.

Ковальчук А.О.

Ляшенко О.Ю.

Ляшенко Ю.О.

Солодовник М.

Тютюнник Н.В.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

