Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U104522

Державний реєстраційний номер: 0116U007066

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-03-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Атомістичне моделювання дифузії у високоентропійних сплавах. Угамування ультразвуку в аморфних металевих сплавах.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний 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: Президія Національної академії наук України

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.): 2080.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Кінетика фазових перетворень в конденсованих системах. Розвиток теорії ядерних взаємодій при високих енергіях.

Назва роботи англійською:

Kinetics of phase transformations in condensed systems. The development of theory of nucleus interactions at high energies.

Реферат українською:

У першому розділі звіту детально описані результати досліджень за 2020 рік. Методом молекулярної динаміки досліджено механізми дифузії в еквіатомному сплаві AlCoCuFeNi. Внаслідок композиційного безладу локальні об'єми і енергії атомів розподілені в широких інтервалах. Запропоновано процедуру розрахунку локальних енергій формування точкових дефектів у багатокомпонентному твердому розчині. Температурно-залежні ефективні енергії утворення дефектів є функціоналами розподілів відповідних локальних енергій. Встановлено, що міжвузлова дифузія є основним механізмом самодифузії за високої температури. Проведено дослідження поглинання ультразвуку в об'ємному металевому склі Zr52,5Ti5Cu17,9Ni14,6Al10 для частоти 20, 50 і 150 МГц в області температур 80-300 К. На підставі даних експерименту оцінено спектр енергій активації дефектів, відповідальних за загасання. Результати обговорюються в рамках релаксаційної моделі Дебая. У другому розділі подані найбільш важливі результати, отримані за період виконання теми (2016-2020 рр.). За результатами досліджень опубліковано 2 монографії, 79 статей в наукових періодичних виданнях. На міжнародних конференціях представлено 56 доповідей.

Реферат англійською:

The first section of the report describes in detail the results of research for the year 2020. The mechanisms of diffusion in an equiatomic alloy AlCoCuFeNi were studied by the method of molecular dynamics. Due to the compositional disorder, the local volumes and energies of atoms are found to be widely distributed. The procedure was proposed for calculation of local formation energies of point defects in a multicomponent solid solution. The temperature-dependent effective defect formation energies are found to be functionals of distributions of the corresponding local energies. It is established that interstitial diffusion is the main mechanism of self-diffusion at high temperatures. The study of ultrasound absorption in bulk metal glass Zr52.5Ti5Cu17.9Ni14.6Al10 was performed for frequencies of 20, 50 and 150 MHz in the temperature range of 80-300 K. Based on the experimental data, the spectrum of activation energies of the defects responsible for attenuation is estimated. The results are discussed in the framework of the Debye relaxation model. The second section presents the most important results obtained during the project activity period (2016-2020). Based on the research results, 2 monographs and 79 peer reviewed papers were published. 56 talks were presented at international conferences.

Індекс УДК: 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: Механізми дифузії у високоентропійному сплаві

Назва НТП англійською: Diffusion mechanism in a high-entropy alloy

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: Запропоновано процедуру розрахунку локальних енергій формування точкових дефектів у багатокомпонентному твердому розчині. Температурно-залежні ефективні енергії утворення дефектів є функціоналами розподілів відповідних локальних енергій. Показано, що міжвузлова дифузія може бути основним механізмом самодифузії за високої температури.

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. Bakai O.S., Boriskin V.M., Bratchenko M.I., Dyuldya S.V. Electron irradiation, temperature, and stress effect on corrosion of Zr-, Ni-Cr-, and Fe-Cr-based alloys in the vicinity of the water coolant supercritical transition // Problems of Atomic Science and Technology. Ser.: Vacuum. Pure Metals. Superconductors. 2020. Iss. 1(125). P. 68–77. https://vant.kipt.kharkov.ua/ANNOTAZII_2020/annotazii_2020_1_68.html

2. Bakai O., Bratchenko M., Dyuldya S. On the singularity of the liquid-gas coexistence curve diameter // Ukr. J. Phys. 2020. Vol. 65, No. 9. P. 802–809. https://doi.org/10.15407/ujpe65.9.802

3. Bakai O, Bratchenko M. Stochastic dynamics of a nonlinear oscillator driven by periodic force with slowly varying frequency // Low Temp. Phys. 2020. Vol. 46, No. 8, P. 754- 759; // Фізика низьких температур 2020. Т. 46, Вип. 8. С. 899-903; https://doi.org/10.1063/10.0001535

4. Sikora G., Höll M., Gajda J., Kantz H., Chechkin A., Wyłomanska A. Probabilistic properties of detrended fluctuation analysis for Gaussian processes. Phys. Rev. E 101, 032114 (2020) (11pp.). https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.032114

5. Padash A., Chechkin A. V., Dybiec B., Magdziarz M., Shokri B., Metzler R. First passage time moments for asymmetric Lévy flights. J. Phys. A: Math. Theor. 53, 275002 (2020) (43 pp.). https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ab9030/meta

6. Postnikov E.B., Chechkin A. and Sokolov I.M. Brownian yet non-Gaussian diffusion in heterogeneous media: from superstatistics to homogenization. New J. Phys. 22, 063046 (2020) (17 pp.) https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/ab90da

7. Mardoukhi Y., Chechkin A. and Metzler R. Spurious ergodicity breaking in normal and fractional Ornstein–Uhlenbeck process. New J. Phys. 22, 073012 (2020) (17 pp.). https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/ab950b

8. Wang W., Seno F., Sokolov I.M., Chechkin A.V., and Metzler R. Unexpected crossovers in correlated random-diffusivity processes. New J. Phys. 22, 083041 (2020) (15 pp.) https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/aba390

9. Zan W., Xu Y., Kurths J., Chechkin A.V. and Metzler R. Stochastic dynamics driven by combined Lévy–Gaussian noise: fractional Fokker–Planck–Kolmogorov equation and solution. J. Phys. A: Math. Theor. 53, 385001 (2020). https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aba654/meta

10. Wang W., Cherstvy A.G., Chechkin A.V., Thapa S., Seno F., Liu X., and Metzler R., Fractional Brownian motion with random diffusivity: emerging residual nonergodicity below the correlation time. J. Phys. A: Math. Theor. 53, 474001 (2020) (20 pp.). https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aba467

11. Kurilovich A.A., Mantsevich V.N., Stevenson K.J., Chechkin A.V., and Palyulin V.V., Complex diffusion-based kinetics of photoluminiscence in semiconductor nanoplatelets. Physical Chemistry Chemical Physics 22, 24686 2020 (11 pp.). https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/cp/d0cp03744c#!divAbstract

12. Capala K., Padash A., Chechkin A.V., Shokri B., Metzler R., and Dybiec B., Lévy noisedriven escape from arctangent potential wells. Chaos 30, 123103 (2020) (15pp.); doi: 10.1063/5.0021795 https://doi.org/10.1063/5.0021795

13. Arslanaliev A., Kostylenko Y., and Shebeko A.. QED in the Clothed- Particle Representation. In: Recent Progress in Few-Body Physics. Ed. by N. A. Orr et al. Springer International Publishing, 2020, p. 41. https://www.springer.com/gp/book/9783030323561#

14. Kostylenko Y., Arslanaliev A., and Shebeko A.. QED in the clothed- particle representation: a fresh look at positronium properties treatment. In: Sci. Post Phys. Proc. 3. 2020, p. 45. https://scipost.org/SciPostPhysProc.3.045

15. Степановський Ю.П. Квадратні корені із еліпсів Кеплера, електрони та рідберґівські атоми у магнітному полі // УФЖ – 2020. – Т. 65, № 10. – сс. 829-851. https://doi.org/10.15407/ujpe65.10.835

16. Alekseechkin N.V., Kinetics of the surface-nucleated transformation of spherical particles and new model for grain-boundary nucleated transformations, Acta Materialia 201 (2020) 114-130. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.09.061

17. Sabooni S., Galinmoghaddam E., Turkin A. A., Lu L. Q., Westerwaal R. J., Boelsma C., Zoestbergen E., Pei Y. T. Tailoring vapor-deposited ZnMg–Zn bilayer coating for steels by diffusion-driven phase transformation. Journal of Alloys and Compounds, V. 836, 2020, p. 155448. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.155448

18. Burdeinyi D., Kutnii D., Vanzha S., Levenets V., Turkin A. A new nondestructive iterative method for forensics characterization of uranium-bearing materials by HRGS, Applied Radiation and Isotopes 166 (2020) 109433. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109433

19. Бакай А.С., Борискин В.Н., Братченко М.И., Дюльдя С.В. Моделирование радиационного поля и активации образцов в камере облучения Сверхкритической Водной Конвекционной Петли ННЦ ХФТИ. Тез. докл. XVIII Конф. по физ. высоких энергий и ядерной физ. Харьков, ННЦ ХФТИ, 24–27 марта 2020 г. С.76.

20. Shebeko A., Kamada H., Stepanova M., Arslanaliev A., Golak J., Witala H., Skibinski R., The Kharkov potential in the theory of 2N- and 3N- systems with solving the relativistic Faddeev equations, LXX International conference "NUCLEUS-2020. Nuclear physics and elementary particle physics. Nuclear physics technologies", Saint Petersburg University, Russia, 11-17 October 2020.

21. Shebeko A., Arslanaliev A., The gauge-invariant description of the alpha-alpha bremsstrahlung with initial and final state interactions included, LXX International conference "NUCLEUS-2020. Nuclear physics and elementary particle physics. Nuclear physics technologies", Saint Petersburg University, Russia, 11-17 October 2020.

22. Kotlyar V., Pythia and J/psi with jets. Workshop "Quarkonia As Tools 2020", Centre Paul Langevin, (12-18 January 2020, Aussois, France)

23. Котляр В.В., Рождение чармониев в столкновениях протонов на большом адронном коллайдере ЦЕРН., "XVIII конференция по физике высоких энергий и ядерной физике", Тезисы докладов, 2020, с. 24

24. Котляр В.В., Корреляции в рождении b–кварков и W–бозонов в рассеянии протонов, "XVIII конференция по физике высоких энергий и ядерной физике", Тезисы докладов, 2020, с. 28-29.

25. Borisenko A., Byshkin M., Lomi A. A simple algorithm for scalable Monte Carlo inference. European Cooperation for Statistics of Network Data Science virtual meeting, Ludwig-Maximilians-University, Munich, Germany, 24-25 September 2020.

26. Sabooni S., Galinmoghaddam E., Turkin A., Pei Y.T. The effect of annealing treatment on the adhesion performance of a PVD coated ZnMg-Zn steel, 4th European Conf. on Materials, Mechatronics and Manufacturing (Annual meeting of IJMMM, February 15- 17, 2020, Athens, Greece)

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Алєксєєчкин Микола Васильович

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

Котляр Володимир Вікторович

Лаврова Галина Миколаївна

Лазарєв Микола Павлович
(к. ф.-м. н.)

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

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

Фатєєв Михайло Петрович
(к. ф.-м. н.)

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

Шебеко Олександр 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